

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего
профессионального образования «Уральский федеральный университет имени первого
Президента России Б.Н.Ельцина»

УДК 536.421, 532.135

№ госрегистрации 01200905884

Инв. № 02.740.11.0202/6

УТВЕРЖДАЮ

Первый проректор,

к.ист. н., доцент

_____ Бугров Д.В.

«23» июня 2011 г.

ОТЧЕТ

О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

В рамках федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры
инновационной России» на 2009-2013 годы

по теме:

СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В МЕХАНИКЕ ГЕТЕРОГЕННЫХ И
МНОГОФАЗНЫХ СРЕД

(заключительный, этап № 6)

Наименование этапа: «Исследование направленных фазовых переходов в средах со сложной
нелинейной реологией»

Руководитель НИР, д-р физ.-мат. наук, проф.

Иванов А.О.

«23» июня 2011 г.

Екатеринбург 2011

СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

Руководитель темы, зав.кафедрой математической физики, д.физ.-мат.н.	_____	Иванов А.О. (введение, раздел 3, заключение)
Исполнители темы:		
профессор кафедры математической физики, д.физ.-мат.н.	_____	Александров Д.В. (введение, разделы 3, 8, заключение, приложения)
профессор кафедры математической физики, д.физ.-мат.н.	_____	Зубарев А.Ю. (введение, разделы 2)
профессор кафедры математической физики, д.физ.-мат.н.	_____	Ряшко Л.Б. (введение, разделы 4, 5)
директор центра прикладной информатики, д.физ.-мат.н.	_____	Нустров В.С. (введение, раздел 2)
профессор кафедры математической физики, д.физ.-мат.н.	_____	Федотов В.П. (раздел 3)
доцент кафедры математической физики, к.физ.-мат.н.	_____	Искакова Л.Ю. (раздел 2)
доцент кафедры математической физики, к.физ.-мат.н.	_____	Башкирцева И.А. (раздел 7, заключение)
научный сотрудник НИЧ, к.физ.-мат.н.	_____	Губкин А.А. (приложения)
студент, стажер- исследователь НИЧ	_____	Князькова Е.С. (раздел 1)
ведущий программист СКБ «Контур», к.физ.- мат.н.	_____	Стихин П.В. (раздел 7)
с.н.с. НИЧ, к.физ.-мат.н.	_____	Малыгин А.П. (раздел 1, заключение)
доцент кафедры математической физики, к.физ.-мат.н.	_____	Канторович С.С. (раздел 3)
доцент кафедры математической физики, к.физ.-мат.н.	_____	Елфимова Е.А. (раздел 3, заключение)

помощник проректора по научной работе, к.соц.н.	«23» июня 2011 г.	Полякова В.В. (заключение, приложения)
ассистент кафедры математической физики	«23» июня 2011 г.	Кузнецова О.Б. (раздел 8)
ассистент кафедры математической физики, к.физ.-мат.н.	«23» июня 2011 г.	Перевалова Т.В. (раздел 5)
м.н.с. НИЧ	«23» июня 2011 г.	Пьянзина Е.С. (раздел 3)
н.с. НИЧ, к.физ.-мат.н.	«23» июня 2011 г.	Пермикин Д.В. (раздел 3, введение)
стажер-исследователь НИЧ, к.физ.-мат.н.	«23» июня 2011 г.	Менделев В.С. (раздел 3)
н.с. НИЧ, к.физ.-мат.н.	«23» июня 2011 г.	Крутикова Е.В. (раздел 3)
аспирант, лаборант-исследователь НИЧ	«23» июня 2011 г.	Прокопьева Т.А. (заключение)
лаборант-исследователь НИЧ	«23» июня 2011 г.	Александрова И.В. (раздел 6, заключение)
аспирант, инженер-исследователь НИЧ	«23» июня 2011 г.	Чириков Д.С. (раздел 2)
студент, стажер-исследователь НИЧ	«23» июня 2011 г.	Рахматуллина И.В. (раздел 1)
стажер-исследователь НИЧ, к.физ.-мат.н.	«23» июня 2011 г.	Цветков И.Н. (раздел 7)
н.с. НИЧ, к.физ.-мат.н.	«23» июня 2011 г.	Низовцева И.Г. (раздел 1)
н.с. НИЧ, к.физ.-мат.н.	«23» июня 2011 г.	Иванов А.А. (заключение, приложения)
аспирант, стажер-исследователь НИЧ	«23» июня 2011 г.	Карпенко Л.В. (приложения)
аспирант, стажер-исследователь НИЧ	«23» июня 2011 г.	Зверев В.С. (раздел 3)
аспирант, инженер-исследователь НИЧ	«23» июня 2011 г.	Костенко В.О. (раздел 3)

студент	<hr/> «23» июня 2011 г.	Турышева Е.В. (раздел 5)
студент	<hr/> «23» июня 2011 г.	Кузнецов А.С. (раздел 7)
студент	<hr/> «23» июня 2011 г.	Ефимова В.А. (раздел 4)
аспирант	<hr/> «23» июня 2011 г.	Епифанов Ю.А. (раздел 2)
Нормоконтролер: Начальник управления научных исследований	<hr/> «23» июня 2011 г.	Ларионов В.Н.

РЕФЕРАТ

Отчет 189 с., 116 источников, 58 рисунков, 5 прил.

Ключевые слова: фазовые переходы, кристаллизация, тонкие пленки, сложные жидкости, феррожидкости, цепочечные агрегаты, вязкоупругость, стохастическая чувствительность, стохастические аттракторы, начальная магнитная восприимчивость, намагниченность, вириальное разложение, свободная энергия.

Объектом исследований является изучение нелинейной динамики различных процессов физико-химической механики, протекающих в гетерогенных и многофазных средах в сопровождении структурно-фазовых превращений в этих средах.

В процессе работы был проанализирован и обобщен большой объем зарубежной и отечественной литературы, посвященной разработкам теоретических моделей и подходов, применяемых к исследованию поставленных задач. Промежуточная цель настоящей НИР состояла в решении следующих задач в соответствии с Техническим заданием и Календарным планом выполнения работ: 1. Развитие теории роста дендритов в переохлажденной бинарной системе при учете течений гетерогенной жидкости с ядрами новой фазы и процессов тепломассопереноса; 2. Развитие теории нелинейной вязкоупругости в многокомпонентных гетерогенных средах; 3. Сравнение теоретических предсказаний магнитных свойств сильно концентрированных магнитных нанодисперсных жидкостей с экспериментальными данными и данными компьютерного моделирования; 4. Исследование возможных типов стохастических бифуркаций и разработка конструктивных методов их анализа для изучаемых систем; 5. Стохастический анализ переходов между аттракторами, вызванных случайными возмущениями; 6. Проведение патентных исследований по тематике проекта; 7. Исследование механизмов обратных стохастических бифуркаций; 8. Внедрение результатов НИР в образовательный процесс. Все запланированные работы выполнены в полном объеме.

В ходе выполнения НИР были получены конкретные результаты, которые кратко могут быть сформулированы следующим образом.

Аналитически исследована морфологическая неустойчивость процесса кристаллизации при наличии анизотропной и неоднородной области фазового перехода с учетом течения в жидкости и конвективного тепломассопереноса в двухфазной зоне. Рассмотрен механизм нарушения устойчивости процесса затвердевания, заключающийся в конвективном переносе тепла и примеси, течениях жидкости по каналам области фазового перехода. Проведен линейный анализ морфологической устойчивости с учетом течения

среды в жидкой фазе системы, диффузии примеси в двухфазной зоне и зависимости коэффициентов переноса от фазового состава. Определен параметр эволюции возмущений для анизотропной и неоднородной двухфазной зоны, получены кривые нейтральной устойчивости процесса. Показано, что учет диффузии примеси и увеличение неоднородности зоны фазового перехода расширяют область неустойчивости, а уменьшение анизотропии приводит к ее сужению. Найден новый критерий конвективно-морфологической неустойчивости процесса кристаллизации с двухфазной зоной, который существенно расширяет область неустойчивости при увеличении скорости течения жидкости.

Проведен слабонелинейный анализ на морфологическую устойчивость кругового кристалла в произвольном режиме роста, и найдено поле концентрации, скорость роста и радиус потери устойчивости кристалла в третьем порядке теории возмущений. Найдено, что с увеличением номера возмущающей гармоники линейный критический радиус при любом режиме роста возрастает, а квадратичная поправка к нему убывает. Обнаружено, что увеличение амплитуды возмущения приводит к уменьшению радиуса устойчивости кристалла, что может говорить о возможности сосуществовании морфологических фаз.

Проведены теоретические и экспериментальные исследования нелинейной вязкоупругости в двух типах многокомпонентных магнитных жидкостей. 1-й тип: традиционная полидисперсная магнитная жидкость, в которой наиболее крупные индивидуальные магнитные частицы могут объединяться в цепочечные агрегаты. Показано, что присутствие фракций относительно мелких частиц может, в зависимости от их размера, увеличивать или уменьшать реологические эффекты. Следовательно, реологические свойства реальных феррожидкостей чувствительны не только к присутствию наиболее крупных частиц, но и к особенностям распределения по размерам мелких частичек. 2-й тип: композиционная магнитная жидкость с кластерами однодоменных магнитных наночастиц, образующих квазисферические агрегаты, скрепленные полимерной шубой. Показано, что такие системы демонстрируют гораздо более сильные реологические эффекты, чем традиционные феррожидкости, где частицы индивидуальны. Результаты исследований 6-го этапа органически связаны с исследованиями реологических свойств и структурных превращений в суспензиях простых и магнитных частиц, проводимых на предыдущих этапах. Исследования показали, что эффекты контактного трения между частицами плотных суспензий с объемной долей твердой фазы 45-55% определяются эффектами контактного трения между частицами. Наблюдаемые в экспериментах реологические неустойчивости и автоколебания объясняются эффектами отрицательной дифференциальной вязкости в комбинации с вязкоупругостью среды. Нелинейные вязкоупругие эффекты в магнитных суспензиях объясняются эволюцией роста-разрушения внутренних гетерогенных агрегатов

(цепочек), образуемых магнитными частицами суспензии. Полученные при выполнении проекта результаты объясняют широкий класс реологических явлений, наблюдающихся в экспериментах, но до сих пор не получивших теоретического объяснения. Эти результаты могут быть использованы как в качестве основы для дальнейшего развития науки о динамических свойствах суспензий и других сложных жидкостей, так и для развития научной основы высокотехнологичных применений сложных жидкостей в промышленных и медико-биологических приложениях, а также для моделирования геофизических явлений, связанных с движением мокрых почв грунтов, глинистых масс и т.д.

Были продолжены исследования гидромеханики магнитных жидкостей. Развита статистико-механическая теория монослоев магнитных жидкостей. Исследованы структурные свойства магнитных жидкостей с цепочечными агрегатами. Определены структурные, термодинамические, диффузионные свойства неагрегированной магнитной жидкости. Изучено поведение магнитной жидкости во внешнем однородном магнитном поле. Определены магнитные характеристики высококонцентрированной феррожидкости. Проведено сравнение полученных теоретических результатов с данными компьютерного моделирования и физическими экспериментами.

Разработан общий вариант метода функций Ляпунова для анализа экспоненциальной среднеквадратичной устойчивости компактных инвариантных многообразий нелинейных стохастических дифференциальных уравнений. Для исследования поведения случайных траекторий вблизи инвариантного многообразия введена конструкция системы стохастического линейного расширения и понятие P -устойчивости, доказана теорема о стохастической устойчивости по первому приближению, получен общий критерий, сводящий исследование стохастической устойчивости к оценкам спектрального радиуса некоторого положительного оператора. Как следствие этих результатов, получены новые конструктивные параметрические критерии стохастической устойчивости как для точки покоя, так и для основных колебательных режимов - предельного цикла и тороидального инвариантного многообразия; решена задача об устойчивости линейных стохастических систем с периодическими коэффициентами. Для проверки этих критериев построены эффективные итерационные численные алгоритмы, доказана их сходимость, разработаны необходимые программные средства.

Для исследования стохастических аттракторов разработан общий подход, использующий функцию стохастической чувствительности, позволяющий в конструктивной форме описывать и анализировать стохастические предельные циклы в зоне удвоения периода при переходе от порядка к хаосу как для непрерывного, так и для дискретного

случая. На основе данной техники построен метод доверительных областей (эллипсов и торов).

Разработанная математическая теория стохастической чувствительности использована в ряде приложений. Для модели течения сложной жидкости выявлен вероятностный механизм наблюдаемых явлений возбуждения индуцированных шумом осцилляций. Проведено детальное исследование стохастических предельных циклов в зоне удвоения периода для моделей Лоренца и Ферхюльста. Для коэффициента стохастической чувствительности найден универсальный показатель геометрического роста при переходе через каскад бифуркаций удвоения периода в зоне перехода от порядка к хаосу.

Методом функции стохастической чувствительности исследован вероятностный механизм индуцированных шумом переходов между сосуществующими предельными циклами системы Лоренца. Разработан подход, позволяющий методом функции стохастической чувствительности исследовать индуцированные шумом переходы между соседними точками аттракторов модели Ферхюльста, приводящие к снижению кратности стохастических циклов и порождать обратные стохастические бифуркации.

На последнем этапе проекта было завершено построение теории и методики анализа обратных стохастических бифуркаций для общего многомерного случая. Конструктивные возможности разработанного подхода детально продемонстрированы на примере классической системы Эно. В случае одно- и двумерных систем, когда удастся аналитически построить функцию стационарной плотности распределения случайных состояний аттракторов, в окончательной виде представлены результаты исследования возможных сдвигов и качественных преобразований форм стохастических аттракторов. Полученные результаты наглядно показывают принципиальные различия в характере воздействия аддитивных и параметрических случайных возмущений.

Указанные работы выполнены в полном объеме. Решение вышеуказанных научных проблем составляет основные результаты проведенной НИР. Все результаты получены впервые, обладают научной новизной и внедрены в учебный процесс в Уральском федеральном университете. Областью применения результатов является физико-химическая механика гетерогенных и многофазных сред.

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	10
Основная часть	15
1. Развитие теории роста дендритов в переохлажденной бинарной системе при учете течений гетерогенной жидкости с ядрами новой фазы и процессов тепломассопереноса	15
2. Развитие теории нелинейной вязкоупругости в многокомпонентных гетерогенных средах	38
3. Сравнение теоретических предсказаний магнитных свойств сильно концентрированных магнитных нанодисперсных жидкостей с экспериментальными данными и данными компьютерного моделирования	64
4. Исследование возможных типов стохастических бифуркаций и разработка конструктивных методов их анализа для изучаемых систем	75
5. Стохастический анализ переходов между аттракторами, вызванных случайными возмущениями	90
6. Проведение патентных исследований по тематике проекта	106
7. Исследование механизмов обратных стохастических бифуркаций	106
8. Внедрение результатов НИР в образовательный процесс	118
Заключение	119
Список использованных источников	161
Приложения	169

Введение

Многофазные и гетерогенные среды активно исследуются и используются в современных технологиях, требуют разработок новых математических моделей и углубленного изучения имеющихся. Процессы переноса и гидромеханика в них осложнены различными физико-химическими явлениями, такими как химические реакции, агрегирование дисперсных частиц, фазовые превращения и т.п. Это позволяет обобщить данный класс математических моделей (или область знания) в научное направление Физико-химическая механика.

Научная значимость научно-исследовательской работы заключается в поиске новых режимов поведения рассматриваемых систем, построении и анализе новых математических моделей их поведения, обнаружении оптимальных режимов реализации протекающих процессов, установлении основных закономерностей этого протекания с целью управления этими процессами и прогнозировании свойств получаемых посредством их материалов.

Магнитные жидкости (феррожидкости) – коллоидные взвеси однодоменных ферромагнитных частиц в немагнитной жидкой среде. Диаметр частиц в типичных магнитных жидкостях варьируется в пределах 7-20 нм. Чтобы избежать необратимой коагуляции частиц, они покрываются специальными защитными слоями толщиной 2-3 нм. В зависимости от типа феррожидкости, эти слои могут состоять из молекул ПАВ, или иметь ионную структуру. Сразу же после первых сообщений о синтезе стабильных феррожидкостей в 60-х годах прошлого века, эти системы привлекли большой интерес исследователей и практиков благодаря богатому набору уникальных свойств, перспективных для многих высоких и наукоемких технологий. Одной из примечательных особенностей феррожидкостей является их способность менять свои реологические свойства под действием внешнего магнитного поля. Первые теории магнитовязкого эффекта в феррожидкостях имели дело с предельно разбавленными средами, в которых любыми взаимодействиями частиц можно пренебречь. Максимальный рост вязкости феррожидкостей под действием поля, предсказываемый этими моделями, не превышает нескольких процентов. Между тем, эксперименты, выполненные в последние годы, демонстрируют, что многие современные коммерческие феррожидкости обладают сильными магнитовязкими свойствами. Рост их вязкости под действием поля достигает одного-двух десятичных порядков. Особо сильный магнитовязкий эффект наблюдается, если поле ориентировано вдоль направления градиента скорости течения. Исследования показали, что такие сильные магнитореологические эффекты могут обеспечиваться только появлением гетерогенных агрегатов, состоящих из феррочастиц, объединенных силами магнитного взаимодействия.

Известно два типа гетероструктур, возникающих в объемах феррожидкостей – линейные цепочки и объемные плотные «капли», состоящие из огромного числа феррочастиц. Анализ показал, что структуры обоих типов, как цепочечные, так и капельные, могут вызывать сильные магнитореологические эффекты. Следует признать, что на сегодняшний день отсутствует общепринятая теория, которая позволила бы ответить на вопрос, при каких условиях в феррожидкостях возникают цепочечные, а при каких – объемно-капельные микроструктуры. Существующие теории магнитореологических свойств в феррожидкостях, в основном, посвящены стационарным течениям, в которых размер и ориентация микроагрегатов однозначно определяются составом феррожидкости, величиной приложенного магнитного поля, а также градиентом скорости макроскопического течения среды. Наряду со стационарными течениями, большой интерес представляют течения феррожидкостей в условиях, когда градиент скорости движения быстро меняется со временем. Ряд экспериментов показал, что типичные коммерческие феррожидкости обладают выраженными вязкоупругими свойствами, а время их реологической релаксации при изменении градиента скорости варьируется от десятых долей секунды до десяти и более секунд. Эти значения времени релаксации примерно на 4-5 десятичных порядков больше чем предсказывают классические теории идеальных феррожидкостей с невзаимодействующими частицами. Таким образом, физическая природа вязкоупругих эффектов в феррожидкостях до сих пор не выяснена. Представляется вероятным, что измеренное в экспериментах время релаксации вязкого напряжения в феррожидкости определяется кинетикой формирования – разрушения внутренних гетерогенных структур в этих системах после изменения градиента скорости их течения. Насколько нам известно, эффект эволюции внутренних гетерогенных структур в магнитных жидкостях на их реологические свойства не исследован. Ниже предлагается достаточно простая модель эволюции цепочечных агрегатов в феррожидкости, вовлеченной в течение простого сдвига. На основе этой модели исследуются вязкоупругие свойства феррожидкости, зависимость характерного времени гидродинамической релаксации от магнитного поля, величины и характера изменения градиента скорости течения.

Магнитные жидкости все более широко используются во многих современных нанотехнологиях, активно вытесняя традиционные материалы и среды. Благодаря уникальному набору физических свойств эти системы прочно вошли в список так называемых "интеллектуальных" сред. К технологиям, активно использующим магнитные жидкости, относятся микромеханика (магнитоуправляемые узлы конструкций); электроника; машиностроение и робототехника (магнитоуправляемые демпфирующие устройства, амортизаторы для колесных и гусеничных машин высокой проходимости); ранняя

диагностика опухолевых и инфекционных заболеваний при помощи визуализации патогенных областей, в которых происходит накопление вводимых в организм феррочастиц; магнитотранспорт лекарств в пораженную область организма; клеточные биотехнологии; магнитная очистка биотканей от загрязнений и токсинов; терапия раковых и ряда других заболеваний при помощи создаваемой магнитным полем локальной гипертермии. В основе высокотехнологических применений феррожидкостей лежит возможность приводить их в движение и удерживать в нужном месте с помощью внешнего магнитного поля; придавать, с помощью поля, требуемую форму их поверхностям; возбуждать полем внутренние микродвижения, приводящие, в частности, к резкому повышению локальной температуры среды (эффекту локальной гипертермии); кардинально, на порядки величины, менять их физические свойства с помощью внешнего магнитного поля.

Реальные феррожидкости всегда полидисперсны, часто с широким разбросом по размерам частиц. Гетерогенные структуры образуются фракциями наиболее крупных частиц, магнитное взаимодействие между которыми наиболее сильно. Относительно мелкие частицы не образуют агрегаты, однако они могут весьма заметно влиять на структуру феррожидкостей и их реологические свойства.

Эксперименты показывают, что сильные магнитореологические эффекты в феррожидкостях наблюдаются только при относительно малых скоростях деформационного течения, не превышающих 1сек^{-1} . Сильными реологическими эффектами обладают суспензии микронных намагничивающихся частиц – магнитореологические суспензии (МРС). Однако их слабой особенностью является седиментационная неустойчивость – в поле тяжести крупные частицы быстро оседают на дно контейнера с МРС. Поэтому возникла идея синтеза магнитных жидкостей с частицами промежуточных размеров, которые сочетали бы себе сильный реологический отклик на магнитное поле, характерный для МРС и седиментационную устойчивость, типичную для феррожидкостей. Подобные системы с композитными частицами, представляющими собой агрегаты однодоменных ферромагнитных наночастиц, скрепленных полимерной «шубой», недавно были синтезированы в Техническом университете г.Дрезден. Исследование их реологических свойств представляет значительный научный и практический интерес. Цель отчетного этапа – 1) Анализ влияния относительно мелких частиц полидисперсной феррожидкости на ее реологические свойства. Поскольку в рамках одной модели невозможно описать влияние как капель, так и цепочек на реологию феррожидкости, здесь рассматриваются только цепочечные агрегаты в бидисперсной феррожидкости, состоящей из двух фракций относительно крупных и мелких частиц. Предполагалось, что только крупные частицы могут

объединяться в цепочки, погруженные в газ одиночных мелких частиц, взаимодействующих с цепочками. 2) Исследование реологических свойств композитных магнитных жидкостей с кластерными частицами.

Испарение летучих активных компонентов и/или химическое осаждение газов часто сопровождается появлением и ростом слоев веществ иного химического состава. Математические модели, описывающие эти процессы на базе параболических уравнений с неизвестными подвижными границами, мало изучены. В многофазных системах, характеризующихся нелинейными тепломассообменными процессами на движущихся межфазных границах, известны ситуации неустойчивости форм границ раздела фаз. Примерами могут служить образование дендритов на фронте кристаллизации, рост вязких "пальцев" при фронтальной фильтрации и перколяции и пр. Подобные неустойчивости часто обладают свойством самоподобия на различных пространственных и временных масштабах, что позволяет говорить о фрактальной структуре таких объектов. Одним из типичных примеров является возникновение фрактальных кластеров, образующихся за счет слипания молекул или частиц. Образование таких агрегатов качественно меняет теплофизические, гидродинамические, светорассеивающие свойства, что относит коллоидные системы к материалам с управляемыми свойствами. К настоящему времени известны многочисленные работы по свойствам фрактальных кластеров (Виттен и Сандерс, 1982-83; Микин, Жюльен и др., 1985-99; Смирнов, 1988). Однако все эти исследования имеют экспериментальную или компьютерно-моделирующую направленность. Отличием проекта является то, что в нем предусматривается развитие принципиально иного подхода к проблеме: разработка и анализ распределенных физико-математических моделей на базе уравнений тепломассопереноса.

В теории динамических систем со случайными возмущениями рассматриваются различные виды стохастической устойчивости: по вероятности, с вероятностью единица; устойчивость в целом и асимптотическая; экспоненциальная -устойчивость, касающаяся поведения моментов n -го порядка. Большая литература посвящена изучению количественных характеристик асимптотического поведения решений стохастических систем: ляпуновские экспоненты моментов разного порядка, индекс устойчивости. В данной работе исследуется только один вид стохастической устойчивости - экспоненциальная устойчивость в среднем квадратичном. ЭСК-устойчивость среди вышеназванных является самой сильной. В общей постановке именно для данного типа устойчивости методом функций Ляпунова удалось доказать теорему об устойчивости по первому приближению компактных инвариантных многообразий и получить окончательный результат в форме необходимых и достаточных условий. В работе показано, что проверка полученного алгебраического критерия связана с отысканием спектрального радиуса оператора стохастической устойчивости. В простых

ситуациях этот спектральный радиус можно найти аналитически. Однако, как правило, в практических примерах этого сделать не удастся. В этих обстоятельствах возникает необходимость в использовании полученных авторами численных алгоритмов его приближенной оценки и разработанных соответствующих программных средств.

Основная часть

1. Развитие теории роста дендритов в переохлажденной бинарной системе при учете течений гетерогенной жидкости с ядрами новой фазы и процессов тепломассопереноса

Работы по изучению гидродинамической неустойчивости берут начало с 20-х годов прошлого столетия. Первый пример ламинарного течения жидкости, которое при определенных условиях становилось неустойчивым, дал Тейлор [1]. Возникновение неустойчивости отвечает за разрушение одного режима течения жидкости и приводит к формированию нового при изменении управляющих процессом параметров системы. Устойчивость задач тепло- и массопереноса с подвижными границами типа Стефана впервые была исследована в классической работе Маллинза и Секерки [2] с помощью методов линейной теории гидродинамической устойчивости [3]. В работе [2] была изучена морфологическая устойчивость плоской границы раздела твердой и жидкой фаз - фронта кристаллизации к малым возмущениям его формы. Критерий неустойчивости Маллинза-Секерки сводится к выполнению следующего неравенства:

$$(k_l + k_s)^{-1} \left[k_l \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_{h^+} + k_s \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_{h^-} \right] < -m \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)_{h^+}, \quad (1)$$

где T - температура, C - концентрация примеси, m - коэффициент наклона линии ликвидус, k_l и k_s - коэффициенты теплопроводности в жидкой и твердой фазах, h - координата фронта кристаллизации, а индексы «+» и «-» соответствуют жидкости и твердой фазе.

С другой стороны, вытеснение примеси плоской границей кристалл-расплав в глубь жидкой фазы и ее накопление перед фронтом приводит к возникновению концентрационного переохлаждения. Условие его образования, полученное Иванцовым [4], имеет вид

$$\left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_{h^+} < -m \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)_{h^+}. \quad (2)$$

Концентрационное переохлаждение создает преимущественные условия для роста отдельных выступов твердой фазы в глубь жидкости и, таким образом, приводит к неустойчивости плоской границы раздела фаз и зарождению протяженной области фазового превращения.

Неравенства (1) и (2) на практике не дают существенно различные соотношения и определить какое из них является более точным критерием неустойчивости не представляется возможным [5]. Однако, физический механизм развития неустойчивости содержится в неравенстве (2), в то время как неравенство (1) является просто следствием линейной теории неустойчивости. С физической точки зрения переохлаждение должно предшествовать неустойчивости и являться причиной ее развития [6]. Поэтому в качестве критерия неустойчивости целесообразно использовать неравенство (2) [7].

Развитие неустойчивости приводит к формированию различных ростовых структур твердой фазы (например, ячеек) на фронте кристаллизации, для расчета размеров которых вблизи кривой нейтральной устойчивости используется аппарат нелинейного анализа [8].

Вообще говоря, при выполнении неравенств (1) или (2) классическую модель Стефана с плоским фронтом использовать уже некорректно; необходимо применять теорию двухфазной зоны. Поскольку скрытая теплота, выделяющаяся при кристаллизации жидкости в области фазового перехода, часто компенсирует концентрационное переохлаждение, процессами нуклеации и кинетики в двухфазном слое можно пренебречь и применять квазиравновесную теорию [6, 9]. В работах [7, 10-12] при изучении различных условий нестационарной кристаллизации было показано, что условие (2) удовлетворяется достаточно быстро и в дальнейшем процесс затвердевания протекает при наличии протяженной области фазового перехода. Другими словами, фронтальная межфазная граница существует обычно или на самых ранних этапах процесса или в узком диапазоне параметров системы. Во всех остальных случаях фазовый переход имеет место в достаточно широком слое пространства. Известным примером является замерзание морской воды с образованием шуги льда.

При кристаллизации с двухфазной зоной за формирование различных типов неоднородностей распределения примеси и неровностей границы раздела фаз, как и при фронтальном режиме затвердевания, ответственны различные типы неустойчивости. В литературе различают морфологическую и динамическую неустойчивости. В отличие от продольной слоистости, возникающей в результате морфологической неустойчивости плоского фронта относительно синусоидального возмущения с ненулевым волновым числом, поперечная слоистость есть результат динамической неустойчивости относительно возмущений с нулевым волновым числом (такие возмущения являются самыми опасными - быстрорастущими). Другими словами, можно сказать, что динамическая неустойчивость есть неустойчивость относительно возмущений скорости кристаллизации при сохранении фронтом или двухфазной зоной своей формы.

Поскольку в процессах кристаллизации с протяженной областью фазового перехода доля твердой фазы на границе двухфазная зона - жидкая фаза часто отлична от нуля [7, 13,

14], в таких ситуациях (как и в случае плоского фронта) также может иметь место морфологическая неустойчивость этой границы. Экспериментальные данные [15, 16] и численное моделирование [17] показывают, что течения жидкости в расплаве могут приводить к формированию циркуляционных течений среды по каналам в двухфазной зоне (под каналами понимаются свободные от твердой фазы протоки в двухфазной зоне, заполненные жидкостью). Как показывают экспериментальные данные, при достижении областью фазового перехода некоторой критической толщины h_c , концентрация примеси в жидкости сильно возрастает благодаря притоку примеси из каналов двухфазной зоны [15, 18]. При этом, толщина h_c и количество поступающей из каналов примеси в жидкую часть системы увеличиваются при понижении температуры на границе охлаждения. Вытесненная масса жидкости из каналов замещается потоком, идущим из раствора или расплава в двухфазную область. В качестве одной из причин возникновения каналов можно отметить неустойчивость однородного роста и локальную анизотропию области фазового перехода. Таким образом, возникают замкнутые линии тока, охватывающие двухфазный слой и жидкую часть системы. В работе [19] предложена простейшая модель, демонстрирующая возникновение морфологической неустойчивости границы двухфазная область - жидкость. Эта модель не учитывает распределения и возмущения доли твердой фазы и концентрации примеси в области фазового превращения (при этом, транспорт примеси является причиной появления самой двухфазной зоны). В работе [20] была рассмотрена модель неустойчивости при учете этих распределений, но для изотропной и однородной двухфазной области, а также при использовании ряда упрощающих гипотез. Ниже показано, что совместный учет диффузионных процессов, распределения доли твердой фазы, анизотропии и неоднородности зоны фазового перехода существенно (в разы) увеличивает область морфологической неустойчивости (область развития каналов и других типов неоднородностей). Отметим, что плотность возникающих в двухфазной зоне каналов может изменяться в весьма широких пределах - от одного канала на весь слиток [18] до целой сети каналов, отстоящих друг от друга на расстоянии порядка 1 см. [16]. При этом, образование таких каналов является весьма распространенным явлением. Они являются причиной неоднородного распределения примеси при затвердевании сплавов [21], замедления скорости роста льда при замерзании морской воды [15], перераспределения отложений минералов при кристаллизации магмы [22]. Возможно они также встречаются на границе внутреннего и внешнего ядра Земли [23].

Процессы переноса тепла и массы в области фазового перехода описываются конвективными уравнениями теплопроводности и диффузии примеси, а также уравнением ликвидус, следующим из фазовой диаграммы системы

$$\rho_m c_m \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_l c_l u \nabla T = \nabla(k_m \nabla T) + \rho_s L \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad (3)$$

$$(1 - \varphi) \frac{\partial C}{\partial t} + u \nabla C = \nabla(D_m \nabla C) + (1 - k) C \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad (4)$$

$$T = T_* - mC, \quad (5)$$

где T - температура, C - концентрация примеси, u - скорость жидкости, L - скрытая теплота кристаллизации, k - коэффициент распределения примеси, T_* - температура фазового перехода чистого вещества, ρ_m , c_m , k_m и D_m - плотность, теплоемкость, теплопроводность и коэффициент диффузии примеси, зависящие от доли твердой фазы φ . Зависимости коэффициентов переноса от доли твердой фазы предполагаются линейными, что теоретически было обосновано в [24] для систем с преимущественным направлением роста новой фазы (случай направленного затвердевания). Таким образом, коэффициенты переноса в двухфазной зоне определяются через коэффициенты переноса в твердой и жидкой фазах согласно правилу смесей [24]

$$\rho_m c_m = \rho_l c_l (1 - \varphi) + \rho_s c_s \varphi, \quad k_m = k_l (1 - \varphi) + k_s \varphi, \quad D_m = D_l (1 - \varphi), \quad (6)$$

где индексы s и l обозначают величины, определенные для твердой и жидкой фаз соответственно (диффузией примеси в твердой фазе пренебрегается). Стоит отметить, что при проведении линейного анализа устойчивости любая реальная зависимость этих коэффициентов должна быть линеаризована.

Течение жидкости по каналам двухфазной области будем описывать с помощью уравнения Дарси для пористой среды

$$\mu u = \Pi(\rho_l g - \nabla p_l) \equiv -\Pi \nabla p, \quad (7)$$

где p_1 - давление, μ - коэффициент динамической вязкости, g - ускорение свободного падения, $\Pi = \Pi(\varphi)$ - тензор проницаемости двухфазной зоны, зависящий от доли твердой фазы φ . Отметим, что уравнение (7) применимо если число Рейнольдса $Re \leq S$, где S - число, заключающееся от 3 до 10 [25]. Проницаемости в горизонтальном (Π_h) и вертикальном (Π_v) направлениях связаны с помощью коэффициента анизотропии $0 \leq \beta \leq 1$: $\Pi_h = \beta^2 \Pi_v$ [19]. Изменение проницаемости с глубиной двухфазного слоя связано с наличием температурного градиента. Следуя работе [19], будем моделировать такую зависимость следующим образом:

$$\Pi_v(z) = \Pi_v(0) \exp(\gamma z), \quad \Pi_h(z) = \beta^2 \Pi_v(z), \quad (8)$$

где γ - параметр неоднородности. Такое пространственное распределение подтверждается лабораторными экспериментами [26].

На границе двухфазная зона - жидкость выполняются условия баланса тепла и массы

$$\rho_s L \varphi_b V = k_m(\varphi_b) \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_{b^-} - k_l \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_{b^+}, \quad (9)$$

$$(1-k)C_b \varphi_b V = D_m(\varphi_b) \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)_{b^-} - D_l \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)_{b^+}, \quad (10)$$

где V - скорость движения границы, а индекс b обозначает величину на этой границе.

Будем считать, что в равновесии межфазная граница находится в положении $z = 0$ (рис. 1). Течение жидкости со скоростью U (вызванное движением среды или конвекцией) возмущает границу в некоторое новое положение $z = \zeta(x, t) = \hat{\zeta} \exp(i\alpha x + \sigma t)$, где $\hat{\zeta}$ - амплитуда возмущений, α и σ - волновое число и параметр скорости роста возмущений (параметр неустойчивости), i - мнимая единица. Будем рассматривать ситуацию, когда течение в области, занимаемой жидкостью, безвихревое, а потенциал скорости удовлетворяет уравнению Лапласа $\Delta \Phi = 0$ ($u = \nabla \Phi$). Пренебрегая скоростью течения жидкости в двухфазном слое по сравнению со скоростью течения жидкости в области $z > 0$, на межфазной границе имеем условие непротекания жидкости. С учетом этого запишем потенциал скорости в жидкости

$$\Phi = Ux - iU\zeta(x,t) \exp(-\alpha z). \quad (11)$$

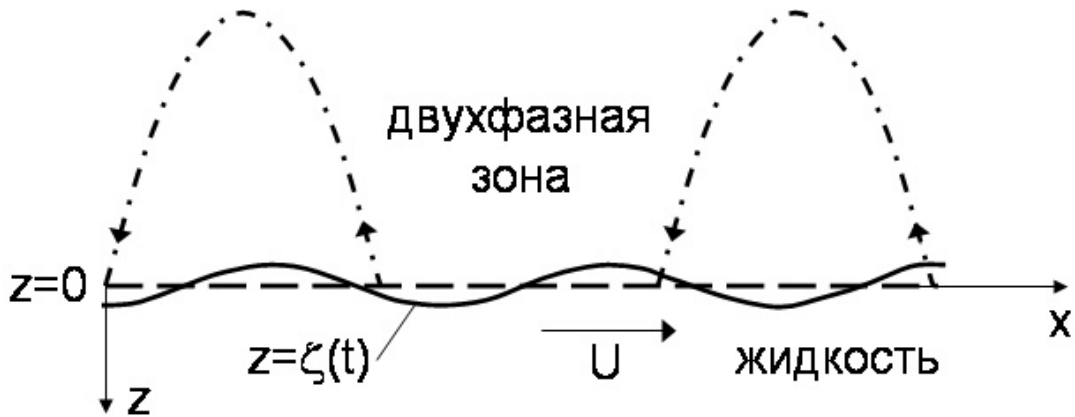


Рисунок 1 — Схема процесса. Пунктирная линия показывает положение межфазной границы в равновесии. Штрих-пунктирные линии изображают течение жидкости в каналах.

Давление на межфазной границе, определяющее течения жидкости по каналам зоны фазового перехода, определяется из уравнения Бернулли с помощью выражения (11) и имеет следующий вид:

$$p = -\rho_l \alpha U^2 \zeta(x,t). \quad (12)$$

Далее, принимая во внимание уравнение неразрывности $\nabla u = 0$ (изменения доли твердой фазы в каналах двухфазной зоны считаются малыми), из соотношений (7) и (8) находим уравнение для давления в области фазового перехода

$$\beta^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \gamma \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} = 0.$$

Его решение имеет вид

$$p = -\rho_l \alpha U^2 \zeta \exp(qz), \quad q = -\frac{\gamma}{2} + \frac{\sqrt{\gamma^2 + 4\alpha^2 \beta^2}}{2}. \quad (13)$$

На поверхности $z = 0$ выражение (13) переходит в (12).

Обычно температурное поле в твердой фазе системы и двухфазной зоне можно считать практически линейной функцией пространственной координаты (см., например, [13, 27, 28]). Это объясняется тем, что время релаксации температуры на несколько порядков

меньше всех остальных характерных времен процесса (времени релаксации диффузионного поля, характерного времени перемещения границы раздела фаз). Учитывая сказанное, имеем: $T(x, z, t) = T_b + Gz + \hat{\theta}(z) \exp(i\alpha x + \sigma t)$, где T_b - температура на межфазной границе, G - температурный градиент. Первые два слагаемых представляют собой температуру в невозмущенном состоянии, а третье характеризует возмущения. При этом, концентрация примеси определяется уравнением (5). Амплитуда возмущений температуры $\hat{\theta}$ находится из системы уравнений (3)-(5) с учетом выражения (13), зависимостей (6) и возмущений доли твердой фазы $\varphi(z, t) = \varphi_0 + \Phi(z) \exp(i\alpha x + \sigma t)$ (здесь φ_0 и Φ - невозмущенное значение и амплитуда возмущений доли твердой фазы). Далее будем использовать в качестве невозмущенного - стационарное приближение $\partial/\partial t \rightarrow 0$, обоснованное в работе [20]. Далее, исключая из системы (3)-(5) концентрацию примеси, возмущая получившиеся уравнения с учетом линейных по возмущениям слагаемых и затем исключая φ_0 , получим уравнение для отыскания амплитуды $\hat{\theta}$

$$\frac{d^2 \hat{\theta}}{dz^2} - \alpha^2 \hat{\theta}(z) = A \exp(\gamma + q)z, \quad (14)$$

где

$$A = \left(1 + \frac{\kappa(K-1)}{KD_l} \right) \frac{\Pi_v(0)\alpha U^2 q G \hat{\zeta}}{\kappa \nu},$$

$$\kappa = k_s/(\rho_l c_l), \quad K = k_s/k_l, \quad \nu = \mu/\rho_l.$$

Решение уравнения (14) с учетом условий ограниченности амплитуды $\hat{\theta}$ при $z \rightarrow -\infty$ и известного значения на межфазной границе $\hat{\theta}(0) = -G\hat{\zeta}$ (последнее следует из температурного распределения), имеет вид

$$\hat{\theta}(z) = -G\hat{\zeta} \exp(\alpha z) + \frac{A[\exp((q + \gamma)z) - \exp(\alpha z)]}{(q + \gamma)^2 - \alpha^2}, \quad \beta \neq 1, \quad \gamma \neq 0. \quad (15)$$

Для изотропной ($\beta = 1$) и однородной ($\gamma = 0$) области фазового перехода из уравнения (14) имеем следующее решение:

$$\hat{\theta}(z) = -G\hat{\zeta} \exp(\alpha z) + \frac{A}{2\alpha} z \exp(\alpha z), \quad \beta = 1, \quad \gamma = 0. \quad (16)$$

Исключая теперь из граничных условий (9) и (10) долю φ_b с использованием выражений (5) и (6), получаем граничное условие на межфазной поверхности

$$\rho_s L V = k_s \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_{b^-} + \frac{(1-k)k_l(T_b - T_*)V}{D_l}. \quad (17)$$

При выводе было использовано условие маргинального равновесия на границе со стороны жидкости [7]:

$$-m \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)_{b^+} = \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_{b^+}.$$

Возмущая выражение (17) вблизи положения равновесия $z = 0$, подставляя затем амплитуды из соотношений (15) и (16), получаем уравнение для определения параметра неустойчивости. Разрешая это уравнение относительно σ , окончательно находим следующий критерий конвективной морфологической неустойчивости:

$$\sigma = \alpha V \left(\frac{B}{q + \gamma + \alpha} - 1 \right) - \frac{(1-k)V^2}{KD_l}, \quad \beta \neq 1, \quad \gamma \neq 0, \quad (18)$$

$$\sigma = \alpha V \left(\frac{B}{2\alpha} - 1 \right) - \frac{(1-k)V^2}{KD_l}, \quad \beta = 1, \quad \gamma = 0,$$

$$B = \frac{A}{\alpha G \hat{\zeta}}, \quad V = \frac{k_s G}{\rho_s L - (1-k)k_l(T_b - T_*)/D_l}.$$

Знак параметра σ определяет области неустойчивости ($\sigma > 0$) и устойчивости ($\sigma < 0$) процесса.

Критерий неустойчивости (18) является основным результатом настоящей теории. Рис. 2 и 3 показывают, что развиваемая теория с учетом диффузии примеси и распределения доли твердой фазы в зоне фазового перехода дает существенное отличие от ранее известного критерия работы [19]. Кривые нейтральной устойчивости $\sigma = 0$ при соответствующих волновых числах отличаются более чем в два раза. Физически это объясняется тем, что

вытесняемая при росте твердой фазы примесь, повышает концентрацию и понижает температуру фазового перехода отдельных областей двухфазной зоны (которые заполнены жидкостью), что повышает неоднородность структурно-фазового состава и является дестабилизирующим процесс фактором. Рис. 2 показывает, что уменьшение параметра анизотропии ведет к расширению области устойчивости, что объясняется ослаблением конвективного переноса в области фазового превращения. Вместе с тем из рис. 3 видно, что увеличение параметра неоднородности приводит к расширению области неустойчивости вследствие более интенсивного тепломассопереноса.

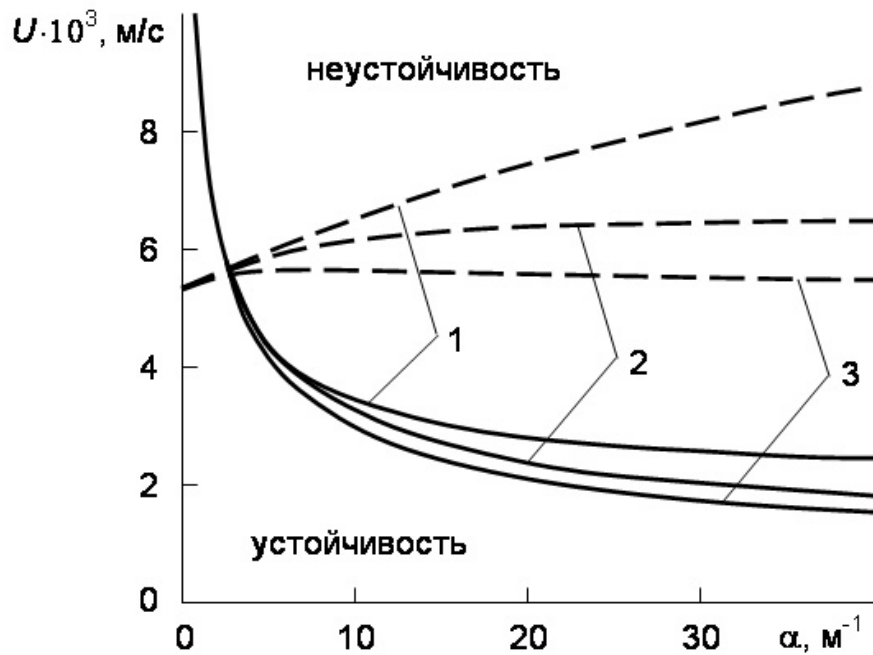


Рисунок 2 — Кривые нейтральной устойчивости для морской воды при различных значениях параметра анизотропии: (1) - $\beta = 0.1$, (2) - $\beta = 0.5$, (3) - $\beta = 1$. Области устойчивости и неустойчивости находятся ниже и выше соответствующих кривых. Сплошные линии - выражения (18), штриховые - упрощенная модель [19], $\nu = 1.07 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$, $\kappa = 1.33 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$, $D = 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$, $V = 10^{-7} \text{ м/с}$, $\Pi_v(0) = 10^{-8} \text{ м}^2$, $K = 3.8$, $k = 0$, $\gamma = 10 \text{ м}^{-1}$.

Отметим еще несколько важных особенностей критерия (18). Увеличение кинематической вязкости ν приводит к уменьшению параметра B и усиливает отрицательный вклад в правую часть выражения (18), т.е. сдвигает процесс в сторону устойчивости. Обратный эффект наблюдается при возрастании скорости жидкости U . При фиксированном значении скорости U сдвиг в сторону коротковолновых возмущений (что

соответствует большим волновым числам) приводит систему в неустойчивое состояние, в то время как критерий работы [19] дает совершенно противоположную картину (рис. 2 и 3). Иначе говоря, возмущения с малой длиной волны легче формируют различные неоднородности. Остановимся на этом подробнее. Можно ожидать, что возмущения формируют неоднородности того же порядка, что и их характерная длина, а меньший размер неоднородности требует преодоления меньшего энергетического барьера для ее образования. Оценим скорость роста шероховатостей межфазной границы, которые могут приводить к турбулизации жидкости вблизи поверхности $z = 0$. Производя оценку параметра σ в (18) как $10^{-5} \text{--} 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ заключаем, что амплитуда неровности в 1 см может возрастает в разы за несколько часов. Для расчета размеров возникающих неоднородных структур необходимо определить амплитуды возмущений, что может быть сделано в рамках нелинейной теории устойчивости. Такой анализ, позволяющий исследовать развитие колебательной неустойчивости вблизи кривой нейтральной устойчивости может быть проведен в духе работы [8].

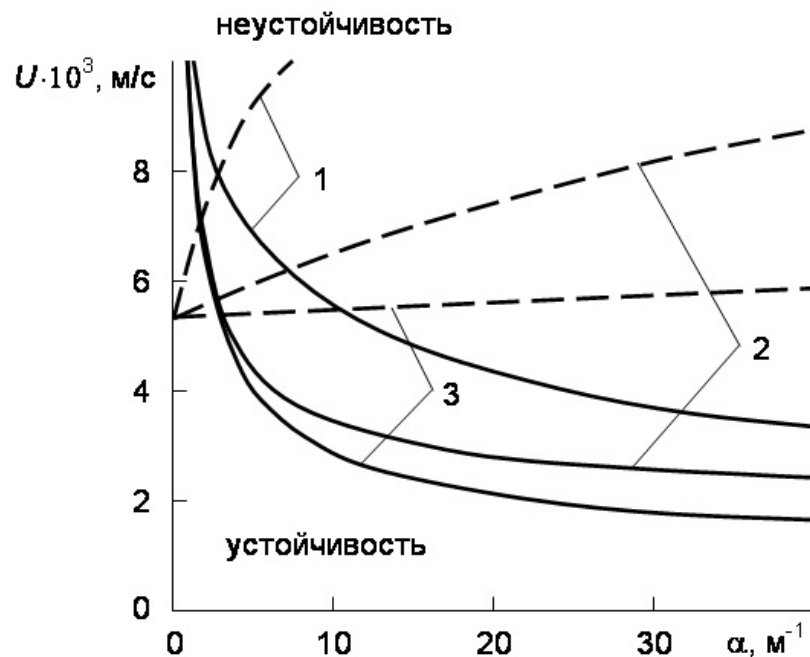


Рисунок 3 — Кривые нейтральной устойчивости для морской воды при различных значениях параметра неоднородности: (1) - $\gamma = 1 \text{ м}^{-1}$, (2) - $\gamma = 10 \text{ м}^{-1}$, (3) - $\gamma = 100 \text{ м}^{-1}$. Области устойчивости и неустойчивости находятся ниже и выше соответствующих кривых. Сплошные линии - выражения (18), штриховые - упрощенная модель [19], $\beta = 0.1$.

Как уже обсуждалось выше, двухфазная зона появляется в результате концентрационного переохлаждения и развития морфологической неустойчивости плоского фронта, описанной в классической работе [2]. При этом, при отсутствии конвекции в процессе может иметь место лишь

динамическая неустойчивость, представляющая собой осцилляции двухфазной области как целого с нулевым волновым числом. Устойчивость области фазового перехода по отношению к таким колебаниям, являющимся наиболее быстрорастущими, была исследована ранее в работе [29]. На рис 4 показана зависимость параметра роста возмущений от скорости кристаллизации для динамической неустойчивости работы [29] и исследуемой морфологической неустойчивости. Их сравнение показывает, что рассматриваемая конвективная неустойчивость увеличивает область динамической неустойчивости '1' до области конвективной неустойчивости '1' + '2'. При этом, возрастание скорости течения жидкости U расширяет область неустойчивости (рис. 4, сплошная и штрихпунктирная кривые). Поскольку фазовый переход очень часто протекает при наличии протяженной области, критерий устойчивости (18) определяет различные режимы протекания таких процессов при наличии ($\sigma > 0$) или отсутствии ($\sigma < 0$) каналов. При этом, возникновение неустойчивости в геофизике сопровождается формированием шероховатостей на границе лед - океан, которые изменяют тепловой поток через ледовую толщу, а в металлургии неустойчивость приводит к образованию неоднородного распределения примеси и неровностей поверхности слитка.

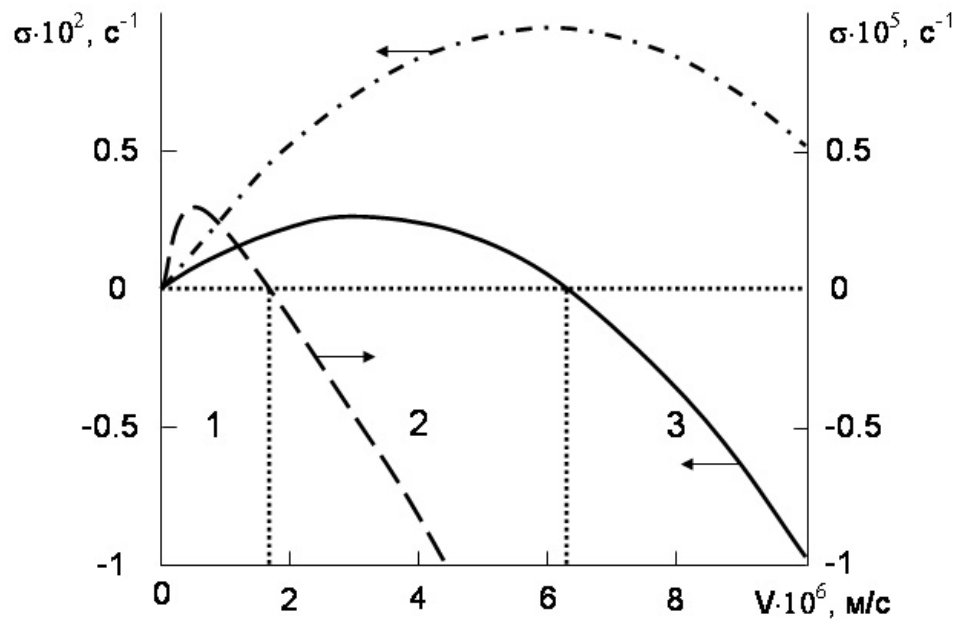


Рисунок 4 — Зависимость параметра неустойчивости от скорости кристаллизации для морской воды. Сплошная и штрихпунктирная линии построены по формуле (18) при $\alpha = 10 \text{ м}^{-1}$, $\beta = 0.5$, $\gamma = 10 \text{ м}^{-1}$, $U = 1.6 \cdot 10^{-2} \text{ м/с}$ и $U = 2.2 \cdot 10^{-2} \text{ м/с}$ соответственно. Пунктирная линия построена по формуле (38) из работы [29]. Точки пересечения кривых с линией $\sigma = 0$ показывают переход через кривую нейтральной устойчивости. Вертикальные линии разделяют три области: динамическая и конвективная неустойчивость (1), динамическая устойчивость и конвективная неустойчивость (2), динамическая и конвективная устойчивость (3).

Рассмотрим теперь рост изначально круглого двумерного единичного кристалла из пересыщенного раствора. Предполагается, что

1. Кристаллизация происходит в изотермо-изобарических условиях. Свободная поверхностная энергия и кинетический коэффициент изотропны.
2. Поле концентраций C описывается уравнением Лапласа

$$\nabla^2 C = 0. \quad (19)$$

3. Произвольное малое искажение круга можно представить суперпозицией гармонических функций вида $\cos k\varphi$, где φ - полярный угол, k - положительное целое число.

4. Концентрация в растворе удовлетворяет следующим граничным условиям:

$$C(R_\lambda) = C_\infty, \quad (20)$$

$$D \frac{\partial C}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\tilde{r}_\Pi} = \beta \left(C|_{\tilde{r}_\Pi} - C_S \right), \quad C_S = C_0 + C_0 \Gamma \tilde{K}, \quad (21)$$

$$\tilde{K} = \frac{\tilde{r}_\Pi^2 + 2(\partial \tilde{r}_\Pi / \partial \varphi)^2 - \tilde{r}_\Pi \partial^2 \tilde{r}_\Pi / \partial \varphi^2}{\left(\tilde{r}_\Pi^2 + (\partial \tilde{r}_\Pi / \partial \varphi)^2 \right)^{3/2}}, \quad (22)$$

где $\tilde{r}_\Pi(\varphi, t) = R + a(t) \cos k\varphi$ - вид искаженной границы круга, $a(t)$ - амплитуда возмущения ($a \ll R$), t - время; R - радиус неискаженного круга, β - кинетический коэффициент кристаллизации меняется в произвольном режиме роста от 0 до ∞ ; C_∞ - концентрация раствора на расстоянии R_λ от кристалла ($R_\lambda \gg R$); \tilde{K} - кривизна искаженной границы круга.

Граничное условие (21) представляет собой баланс вещества, записанный в предположении, что концентрация растворенного вещества пренебрежимо мала по сравнению с плотностью кристалла. Это значительно упрощает решение задачи, при этом оно выполняется для многих реальных кристаллизующихся из растворов систем.

Для удобства дальнейших расчетов перейдем в (19)-(22) к безразмерным величинам, используя в качестве масштаба длины радиус зародышеобразования в пересыщенном

растворе: $R^* = C_0 \Gamma / (C_\infty - C_0)$, а концентрационное поле представим, как $u = (C - C_0) / C_0$. Тогда уравнение Лапласа запишется

$$\nabla^2 u = 0, \quad (23)$$

а граничные условия примут вид

$$u(\rho_\lambda) = \Delta; \quad (24)$$

$$\alpha \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\rho + \delta \cos(k\varphi)} = u \Big|_{\rho + \delta \cos(k\varphi)} - u_S; \quad u_S = K\Delta. \quad (25)$$

Здесь $\mathbf{n} = \tilde{\mathbf{n}} / R^*$, $r = \tilde{r} / R^*$, $\rho = R / R^*$, $\delta(t) = a(t) / R^*$, $\Delta = (C_\infty - C_0) / C_0$ - пересыщение; $K = \tilde{K} R^*$, $\rho_\lambda = R_\lambda / R^*$, $\alpha = D / \beta R^*$ ($\alpha \rightarrow 0$ - диффузионный режим роста, $\alpha \rightarrow \infty$ - кинетический).

В граничном условии (25) можно перейти от оператора $\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}}$ к записи через компоненты, используя

$$\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = \nabla u \cdot \mathbf{e}_n;$$

где

$$\nabla u = \frac{\partial u}{\partial r} \mathbf{i}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \varphi} \mathbf{i}_\varphi; \quad \mathbf{e}_n = \frac{\nabla \Phi}{|\nabla \Phi|}; \quad \Phi(r, \varphi) = r - \rho - \delta \cos(k\varphi);$$

\mathbf{e}_n - единичная нормаль к поверхности $\Phi=0$.

В результате условие (25) перепишется следующим образом

$$\frac{\alpha \left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\delta k}{r^2} \sin k\varphi \frac{\partial u}{\partial \varphi} \right)}{\sqrt{1 + \frac{\delta^2 k^2}{r^2} \sin^2 k\varphi}} \bigg|_{\rho + \delta \cos(k\varphi)} = u|_{\rho + \delta \cos(k\varphi)} - u_S. \quad (26)$$

Представим поле концентрации в виде ряда по степеням δ

$$u(r, \varphi) = u_0(r) + u_1(r, \varphi)\delta + u_2(r, \varphi)\delta^2 + u_3(r, \varphi)\delta^3, \quad (27)$$

где u_0, \dots, u_3 коэффициенты разложения.

Подставляя (27) в исходное уравнение (23) и в граничные условия (24) и (26), разложим каждое слагаемое в ряд Тейлора по δ до третьей степени вблизи ρ . Кривизна в этом случае будет равна

$$K = K_0 + K_1\delta + K_2\delta^2 + K_3\delta^3, \quad (28)$$

где K_0, K_1, K_2, K_3 приведены в приложении. Приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях δ , получим четыре системы уравнений для нахождения $u_0(r)$, $u_1(r, \varphi)$, $u_2(r, \varphi)$, $u_3(r, \varphi)$.

$$\begin{aligned} 1. \quad & \nabla^2 u_0 = 0 \\ & u_0(\rho_\lambda) = \Delta \\ & \alpha \frac{\partial u_0}{\partial r} \bigg|_\rho - u_0|_\rho = K_0 \Delta \end{aligned} \quad (29)$$

$$\begin{aligned} 2. \quad & \nabla^2 u_1 = 0 \\ & u_1(\rho_\lambda) = 0 \\ & \alpha \frac{\partial u_1}{\partial r} \bigg|_\rho - u_1|_\rho = \left(\frac{\partial u_0}{\partial r} \bigg|_\rho - \alpha \frac{\partial^2 u_0}{\partial r^2} \bigg|_\rho \right) \cos k\varphi - K_1 \Delta \end{aligned} \quad (30)$$

$$\begin{aligned}
& \nabla^2 u_2 = 0 \\
& u_2(\rho_\lambda) = 0 \\
3. \quad & \alpha \frac{\partial u_2}{\partial r} \Big|_\rho - u_2 \Big|_\rho = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 u_0}{\partial r^2} \Big|_\rho - \alpha \frac{\partial^3 u_0}{\partial r^3} \Big|_\rho \right) \cos^2 k\varphi + \frac{\alpha k^2 \sin^2 k\varphi}{2\rho^2} \frac{\partial u_0}{\partial r} \Big|_\rho \\
& + \left(\frac{\partial u_1}{\partial r} \Big|_\rho - \alpha \frac{\partial^2 u_1}{\partial r^2} \Big|_\rho \right) \cos k\varphi + \frac{\alpha k \sin k\varphi}{\rho^2} \frac{\partial u_1}{\partial \varphi} \Big|_\rho - K_2 \Delta
\end{aligned} \tag{31}$$

$$\begin{aligned}
& \nabla^2 u_3 = 0 \\
& u_3(\rho_\lambda) = 0 \\
4. \quad & \alpha \frac{\partial u_3}{\partial r} \Big|_\rho - u_3 \Big|_\rho = \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 u_0}{\partial r^3} \Big|_\rho - \alpha \frac{\partial^4 u_0}{\partial r^4} \Big|_\rho \right) \cos^3 k\varphi + \\
& + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial r^2} \Big|_\rho - \alpha \frac{\partial^3 u_1}{\partial r^3} \Big|_\rho \right) \cos^2 k\varphi + \left(\frac{\partial u_2}{\partial r} \Big|_\rho - \alpha \frac{\partial^2 u_2}{\partial r^2} \Big|_\rho \right) \cos k\varphi - \\
& - \alpha \frac{k \sin k\varphi \cos k\varphi}{\rho^2} \left(\left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial r \partial \varphi} \right) \Big|_\rho + \frac{2}{\rho} \left(\frac{\partial u_1}{\partial \varphi} \right) \Big|_\rho \right) - \alpha \frac{k \sin k\varphi}{\rho^2} \left(\frac{\partial u_2}{\partial \varphi} \right) \Big|_\rho + \\
& + \frac{\alpha k^2 \sin^2 k\varphi \cos k\varphi}{2\rho^2} \left(\frac{\partial^2 u_0}{\partial r^2} \Big|_\rho - \frac{2}{\rho} \frac{\partial u_0}{\partial r} \Big|_\rho \right) + \frac{\alpha k^2 \sin^2 k\varphi}{2\rho} \frac{\partial u_1}{\partial r} \Big|_\rho - K_3 \Delta
\end{aligned} \tag{32}$$

Решение уравнения Лапласа в кольце $(\rho < r < \rho_\lambda)$ для каждой i - системы записывается в виде:

$$\begin{aligned}
u_i = & A_{i0} + B_{i0} \ln r + \sum_{n=1}^{\infty} r^{-n} (A_{in} \cos(n\varphi) + B_{in} \sin(n\varphi)) + \\
& + \sum_{n=1}^{\infty} r^n (E_{in} \cos(n\varphi) + F_{in} \sin(n\varphi)),
\end{aligned} \tag{33}$$

где $i = 0, 1, 2, 3$.

Невозмущенное решение (нулевой порядок)

Подставляя (33) с $i=0$ в (29), и приравнявая коэффициенты при соответствующих тригонометрических функциях, получаем

$$A_{0n} = B_{0n} = E_{0n} = F_{0n} = 0, \quad (34)$$

$$A_{00} = \Delta - B_{00} \ln \rho_\lambda, \quad (35)$$

$$B_{00} = \frac{\Delta(\rho - 1)}{\alpha + \rho A_\lambda}, \quad (36)$$

где $A_\lambda = \ln(\rho_\lambda / \rho)$.

В результате решение задачи в нулевом приближении имеет вид:

$$u_0 = \Delta + \frac{\Delta(\rho - 1)}{\alpha + \rho A_\lambda} \ln(r / \rho_\lambda). \quad (37)$$

Решение в первом порядке по возмущению δ

Подставляя решение (33) для $i = 1$ в граничные условия системы (30), и приравнявая коэффициенты при косинусах и синусах с одинаковыми номерами гармоник, получаем две ненулевых постоянных первого порядка при $n=k$: A_{1k} и E_{1k} .

$$A_{1k} = A_1 \cdot z \cdot \rho_\lambda^k \quad (38)$$

$$E_{1k} = -A_1 \cdot z \cdot \rho_\lambda^{-k} \quad (39)$$

где $A_1 = \frac{\Delta(k^2 - 1) - B_{00}(\rho + \alpha)}{\rho(z^2(\alpha k - \rho) + (\alpha k + \rho))}$, $z = \rho^k / \rho_\lambda^k$.

В результате решение системы уравнений (30) запишется в виде

$$u_1(r, \varphi) = A_1 \cdot z \cdot \cos(k\varphi) \left(\frac{\rho_\lambda^k}{r^k} - \frac{r^k}{\rho_\lambda^k} \right) \quad (40)$$

Решение во втором порядке по возмущению δ^2

Подставим решение (33) для $i = 2$ в граничные условия системы (31). Далее выражаем степени тригонометрических функций через тригонометрические функции кратного аргумента и, приравнявая коэффициенты при одинаковых номерах гармоник, получаем для $n=0$ и $n=2k$ четыре ненулевых постоянных второго порядка

$$A_{20} = -B_{20} \cdot \ln \rho_\lambda, \quad (41)$$

$$B_{20} = - \left\{ 2A_1 \rho k (\alpha + \rho) (z^2 + 1) + B_{00} ((\alpha + \rho) - \alpha (k^2 - 1)) + \right. \\ \left. + \Delta (2 - 3k^2) \right\} / \left\{ 4\rho^2 (\alpha + A_\lambda \rho) \right\}, \quad (42)$$

$$A_{2,2k} = A_2 \cdot z^2 \cdot \rho_\lambda^{2k}, \quad (43)$$

$$E_{2,2k} = -A_2 \cdot z^2 \cdot \rho_\lambda^{-2k}, \quad (44)$$

где A_2 приведено в приложении.

Подставляя (41)-(44) в (33) при $i=2$, получим

$$u_2(r, \varphi) = B_{20} \ln(r / \rho_\lambda) + A_2 \cdot z^2 \cdot \cos(2k\varphi) \left(\frac{\rho_\lambda^{2k}}{r^{2k}} - \frac{r^{2k}}{\rho_\lambda^{2k}} \right). \quad (45)$$

Решение в третьем порядке по возмущению δ^3

Для $i = 3$ подставляем (33) в граничные условия системы (32) и, приравнявая коэффициенты при одинаковых номерах синусов и косинусов (предварительно выражая степени тригонометрических функций через тригонометрические функции кратного аргумента), получаем четыре ненулевых постоянных третьего порядка при $n=k$ и $n=3k$:

$$E_{3,k} = -A_{3,k} \cdot \rho^{-2k}, \quad (46)$$

$$E_{3,3k} = -A_{3,3k} \cdot \rho^{-6k}, \quad (47)$$

выражения для $A_{3,k}$ и $A_{3,3k}$, выраженные через постоянные предыдущих порядков, приведены в приложении.

В результате $u_3(r, \varphi)$ можно записать

$$u_3(r, \varphi) = \frac{A_{3,k}}{\rho_\lambda^k} \cos(k\varphi) \left(\frac{\rho_\lambda^k}{r^k} - \frac{r^k}{\rho_\lambda^k} \right) + \frac{A_{3,3k}}{\rho_\lambda^{3k}} \cos(3k\varphi) \left(\frac{\rho_\lambda^{3k}}{r^{3k}} - \frac{r^{3k}}{\rho_\lambda^{3k}} \right). \quad (48)$$

Найденные выражения (37), (40), (45) и (48) совпадают в диффузионном пределе ($\alpha=0$) с приведенными в работе [L.N. Brush, R.F. Sekerka, G.B. McFadden // J. Cryst. Growth 1990. v.100.p. 89-108].

Таким образом, подставляя (37), (40), (45) и (48) в (27), можно записать выражение для поля концентраций $u(r, \varphi)$ в виде ряда по степеням δ .

Расчет радиуса устойчивости кругового кристалла

Зная поле концентрации, определим радиус устойчивости кристалла. Для этого запишем локальную скорость роста V кристалла, которая с точностью до положительной постоянной равна

$$V \sim \left. \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} \right|_{r=\rho+\delta \cos(k\varphi)}. \quad (49)$$

Подставляя $u(r, \varphi)$ в (49), разложим получившееся выражение в ряд вблизи ρ , представляя скорость в виде

$$V = V_0 + (V_1 \cos(k\varphi) + V_2 \cos(2k\varphi) + V_3 \cos(3k\varphi)) / \rho^4 \quad (50)$$

где

$$V_0 = B_{00}/\rho + \left(2A_1\rho k(z^2 + 1) + 4B_{02}\rho^2 - B_{00}(k^2 - 2)\right)\delta^2/(4\rho^3) \quad (51)$$

$$V_1 = \left(\frac{5}{8}A_1\rho k^2(z^2 - 1) - k^2\rho^2 A_2(z^4 - 1) + A_2\rho^2 k(z^4 + 1) - \frac{3}{4}A_1\rho k(z^2 + 1) - A_{3,k}k\rho^{(3-k)}(z^2 + 1) - B_{20}\rho^2 + \frac{3}{8}(k^2 - 2)B_{00}\right)\delta^3 - (A_1\rho k z^2 + B_{00} + A_1\rho k)\delta\rho^2 \quad (52)$$

$$V_2 = \rho \left(-A_1\rho k^2(z^2 - 1) - 2A_2\rho^2 k(z^4 + 1) + \frac{1}{4}(k^2 + 2)B_{00} + \frac{1}{2}A_1\rho k(z^2 + 1)\right)\delta^2 \quad (53)$$

$$V_3 = \left(\frac{1}{8}(3k^2 + 2)B_{00} - 3A_{3,3k}k\rho^{(3-3k)}(z^6 + 1) - \frac{1}{4}A_1\rho k(z^2 + 1) - \frac{1}{2}k^3 A_1\rho(z^2 + 1) - 3k^2\rho^2 A_2(z^4 - 1) + A_2\rho^2 k(z^4 + 1) + \frac{7}{8}A_1\rho k^2(z^2 - 1)\right)\delta^3 \quad (54)$$

Будем рассматривать начальную стадию потери морфологической устойчивости частицей при наложении возмущения на границу и найдем размер, начиная с которого амплитуда возмущения будет расти. Для этого, необходимо решить относительно ρ уравнение:

$$V_1 = 0 \quad (55)$$

Тем самым мы находим критический размер, после которого скорость изменения амплитуды базовой, изначально накладываемой гармоникой $\cos k\varphi$ изменяет свой знак с минуса (что соответствует ее затуханию) на плюс (соответствует ее развитию). Очевидно, что увеличение амплитуды базовой гармоник влечет появление на возмущенной поверхности вторичных гармоник других частот. Поэтому для рассматриваемой начальной стадии потери устойчивости исследование поведения базовой гармоник является определяющим.

Будем искать решение уравнения (55) в виде

$$\rho = g + g_1 \delta^2, \quad (56)$$

где g, g_1 – коэффициенты разложения.

В выражении (56) слагаемое, пропорциональное δ , опущено, так как наличие его в решении (55) не имеет физического смысла из соображений симметрии. Действительно, при наличии члена, пропорционального δ , трансляция возмущения $\cos k\varphi$ на полпериода (что эквивалентно изменению знака амплитуды) приводила бы к изменению критического размера устойчивости при росте в изотропной среде.

Подставляем (56) в явный вид (55) и раскладываем его в ряд по δ до третьего порядка. В результате остаются степени δ и δ^3 . Группируя слагаемые при одинаковых степенях, получаем два уравнения для нахождения g и g_1 . Выразить g явно не удастся, оно определяется уравнением

$$\begin{aligned} & (-g^2 k - g k L + k^3 \alpha + g k^3 L + g k - k \alpha) (h^2 + 1) \\ & + g (g - 1) (1 - h^2) = 0. \end{aligned} \quad (57)$$

g_1 имеет явное выражение:

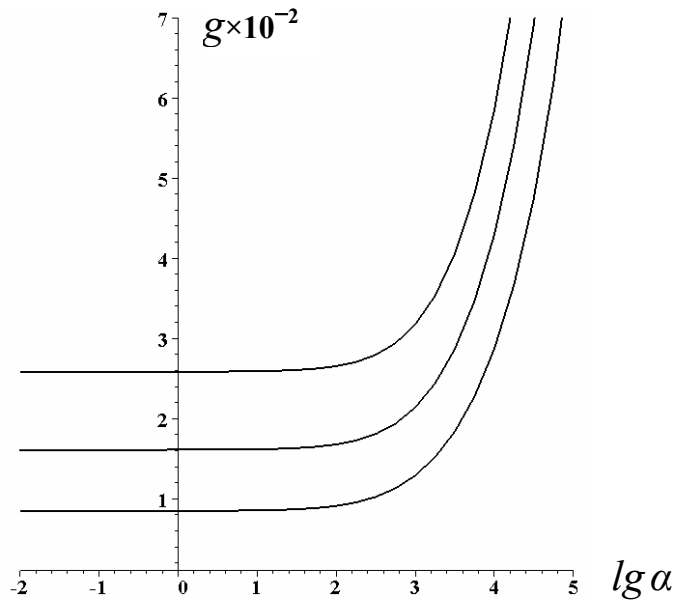
$$\begin{aligned} g_1 = & \left[(M_1 - M_2) h^8 + (M_3 + M_4) h^6 + M_5 h^4 + (M_3 - M_4) h^2 + \right. \\ & + M_1 + M_2 + 6\alpha^4 k^3 (5k^2 - k^4 - 2) \Big] / \left[8g \left[(2\alpha k - g)(M_6 - M_7) h^8 + \right. \right. \\ & + \left. \left. (2\alpha k - g) h^6 + (2\alpha k + g) h^2 \right) M_8 + ((2\alpha k + g)(M_6 - M_7) + \right. \\ & + \left. (2\alpha k - g)(M_6 + M_7)) h^4 + (2\alpha k + g)(M_6 + M_7) \right] \Big]. \end{aligned} \quad (58)$$

где $h = g^k / \rho_\lambda^k$, $L = \ln(\rho_\lambda / g)$, а коэффициенты M_1, M_2, \dots, M_8 приведены в приложении.

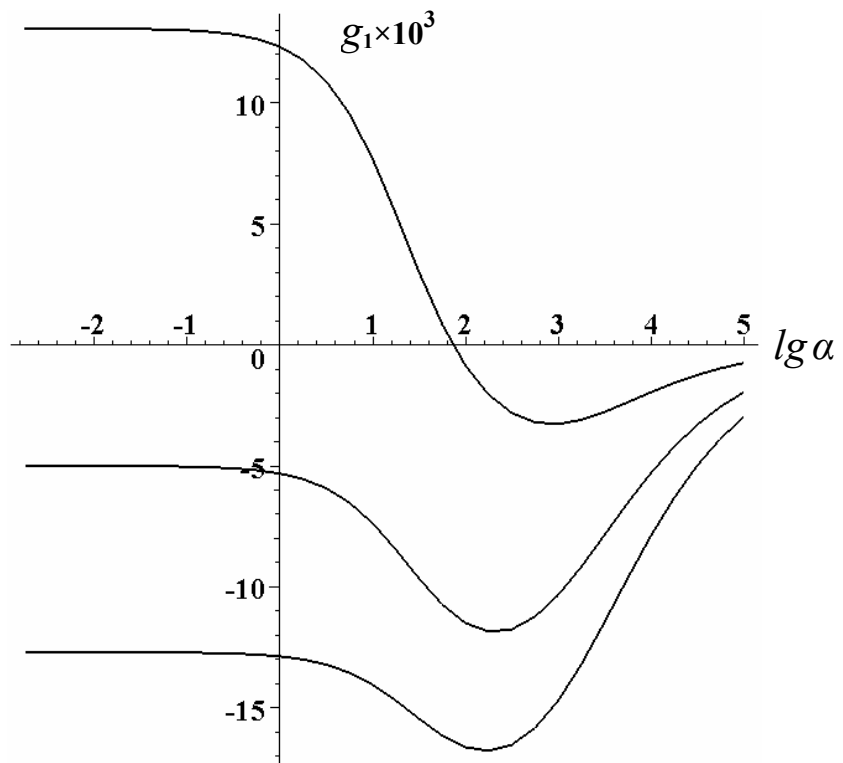
На рис. 5 и 6 приведены полученные зависимости линейного радиуса устойчивости g и поправки второго порядка малости g_1 от входящих в них параметров α, k (параметры системы приведены в Приложении 1).

По результатам расчетов (рис. 5(а), рис. 6(а)), линейный радиус устойчивости g увеличивается с увеличением частоты гармоники и параметра α . Данное поведение можно

объяснить исходя из следующих соображений. Из классической работы [Mullins W.W., Sekerka R.F.//J. Appl. Phys. 1963. v.34, p.323-340.] следует, что основным дестабилизирующим фактором, ответственным за потерю устойчивости, является неоднородность концентрационного поля вблизи кристалла: чем дальше от кристалла, тем раствор более пересыщен.



a)



b)

Рисунок 5 — Зависимость линейного радиуса устойчивости g (a) и квадратичной поправки g_1 (b) от параметра α для различных возмущающих частот k . $\rho_\lambda = 10^8$.

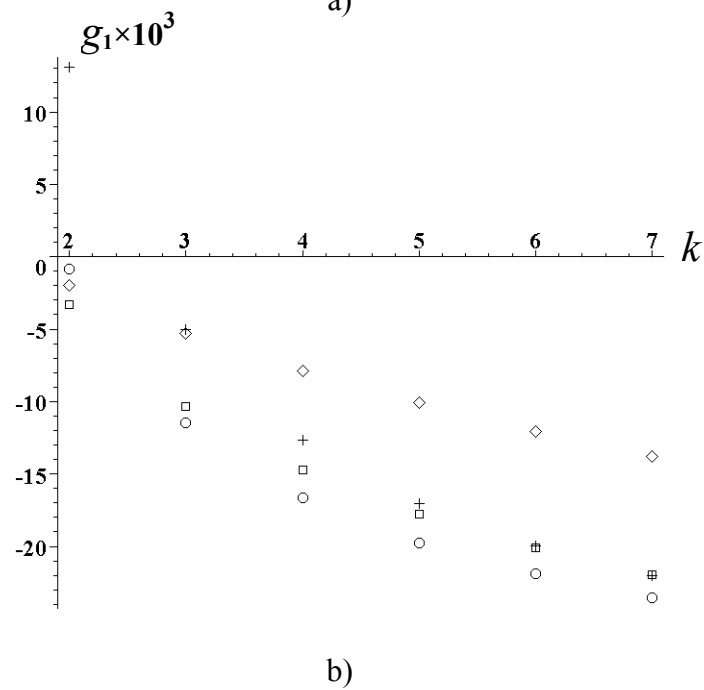
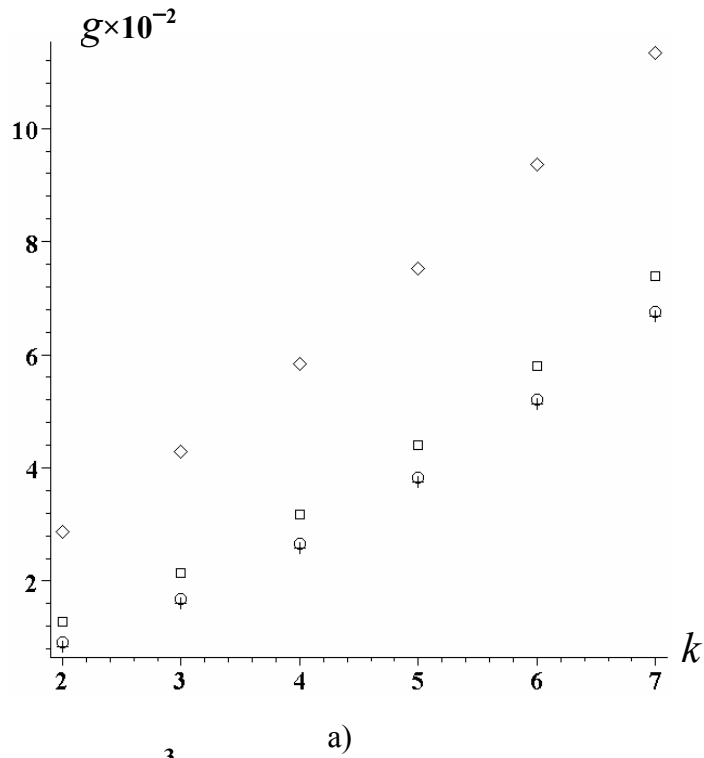


Рисунок 6 — Зависимость линейного радиуса устойчивости g (a) и квадратичной поправки g_1 (b) от частоты возмущения k для различных α . $\rho_\lambda = 10^8$ (+ $\alpha=0$; ○ $\alpha=100$; □ $\alpha=1000$; ◇ $\alpha=10000$).

Поэтому, возмущение, возникшее на поверхности кристалла, попадает в более благоприятные условия и может быстрее развиваться. Основным стабилизирующим

фактором является кривизна поверхности (поверхностная энергия): чем больше кривизна у возникшего выступа, тем легче ему диссипировать.

Таким образом, если рассмотреть два зародыша с возмущениями одинаковой амплитуды, но с разными номерами гармоник – то для возмущения с большей частотой кривизна будет больше и соответственно будет больше стабилизирующий фактор, как следствие, зародыш по отношению к такому возмущению потеряет устойчивость при большем критическом размере. С увеличением же α поле вблизи кристалла становится все более однородным, соответственно дестабилизирующий фактор уменьшается, и g увеличивается.

В отличие от g поведение и знак g_1 являются не столь очевидными. Как видно из рис. 5(b) и рис. 6(b), возрастание амплитуды возмущения приводит в большинстве случаев к тому, что радиус потери устойчивости уменьшается по сравнению с линейным случаем (увеличение наблюдается только в диффузионном режиме роста для гармоники с $k=2$). Однако с увеличением амплитуды (α , k – фиксируем) возмущение с одной стороны попадает в область более пересыщенного раствора (т.е. увеличивается дестабилизирующий фактор), а с другой кривизна увеличивается (т.е. увеличивается стабилизирующий фактор). То, что в конкуренции этих двух процессов первый фактор практически всегда оказывается определяющим, является очень интересным результатом.

По результатам этой части работы можно сформулировать следующие выводы.

Аналитически исследована морфологическая неустойчивость процесса кристаллизации при наличии анизотропной и неоднородной области фазового перехода с учетом течения в жидкости и конвективного теплопереноса в двухфазной зоне. Рассмотрен механизм нарушения устойчивости процесса затвердевания, заключающийся в конвективном переносе тепла и примеси, течениях жидкости по каналам области фазового перехода. Проведен линейный анализ морфологической устойчивости с учетом течения среды в жидкой фазе системы, диффузии примеси в двухфазной зоне и зависимости коэффициентов переноса от фазового состава. Определен параметр эволюции возмущений для анизотропной и неоднородной двухфазной зоны, получены кривые нейтральной устойчивости процесса. Показано, что учет диффузии примеси и увеличение неоднородности зоны фазового перехода расширяют область неустойчивости, а уменьшение анизотропии приводит к ее сужению. Найден новый критерий конвективно-морфологической неустойчивости процесса кристаллизации с двухфазной зоной, который существенно расширяет область неустойчивости при увеличении скорости течения жидкости.

Впервые проведен слабонелинейный анализ на морфологическую устойчивость кругового кристалла в произвольном режиме роста, и найдено поле концентрации, скорость

роста и радиус потери устойчивости кристалла в третьем порядке теории возмущений. Найдено, что с увеличением номера возмущающей гармоники линейный критический радиус при любом режиме роста возрастает, а квадратичная поправка к нему убывает. Обнаружено, что увеличение амплитуды возмущения для $k > 2$ приводит к уменьшению радиуса устойчивости кристалла, что может говорить о возможности сосуществовании морфологических фаз. Получена немонотонная зависимость квадратичной поправки g_1 к линейному радиусу устойчивости от режима роста: в диффузионном режиме ($\alpha < 1$) g_1 убывает, а в кинетическом ($\alpha > 100$) – возрастает.

2. Развитие теории нелинейной вязкоупругости в многокомпонентных гетерогенных средах

Бидисперсные феррожидкости

Основные допущения. Большинство теоретических работ, посвященных внутренним структурам в феррожидкостях и их влиянию на макроскопические свойства этих систем, основаны на предположении о том, что все частицы феррожидкости имеют одинаковые размеры. Однако реальные феррожидкости всегда полидисперсны, часто с широким распределением по размерам частиц [30, 31]. Очевидно, полидисперсность феррожидкостей может существенно сказываться на особенностях внутренних гетерогенных структур и на макроскопических эффектах, порождаемых этими структурами.

Сильные магнитореологические эффекты, обнаруженные в экспериментах [31-35] с различными феррожидкостями, могут быть объяснены только возникновением в этих системах внутренних гетерогенных структур. Известно два основных типа таких структур – линейные цепочки и объемные капли [32, 33, 36-43]. Оба типа структур могут вызывать сильные реологические эффекты в феррожидкостях. Влияние мелких частиц на равновесные цепочечные структуры в феррожидкостях теоретически изучалось в [44].

В работах [45-48] показано, что вязкоупругие эффекты в феррожидкостях могут быть вызваны кинетикой роста-разрушения цепочечных агрегатов. В работе [49] была предложена модель кинетики роста-разрушения цепочек в магнитных суспензиях. Эта модель основана на системе кинетических уравнений для функции распределения по размерам цепочек. Здесь, при анализе кинетики роста (разрушения) цепочек и их влияния на макроскопические реологические свойства бидисперсной феррожидкости, будем основываться на результатах работ [44-48] и приближениях, использованных ранее в работах [32, 36, 50-52]. Несмотря на то, что эти приближения очень сильные, они, все же, позволяют получить оценки для

стационарной вязкости феррожидкости [31-35, 37], неплохо соответствующие экспериментам.

Во-первых, необходимо иметь в виду, что все реальные феррожидкости полидисперсны, часто с широким распределением по размерам частиц. Типичные диаграммы распределения по размерам частиц в феррожидкостях можно найти в [31]. Учет существования большого числа фракций частиц с различными размерами делает задачу об определении внутренней микроструктуры феррожидкости чрезвычайно тяжелой. Для того, чтобы максимально упростить вычисления и получить физические результаты в приемлемом виде, рассматривается феррожидкость как бидисперсная суспензия больших и малых ферромагнитных сфер. Известно [31, 53], что магнитный момент m достаточно крупной ферромагнитной частицы в заморожен в ее тело – при динамических процессах частица поворачивается (вращается) вместе со своим магнитным моментом. Предполагается, что это условие выполнено.

Во-вторых, пренебрегается флуктуационной гибкостью цепочек, они рассматриваются как прямые стержнеобразные агрегаты. Магнитные моменты частиц в каждой цепочке предполагаются выстроенными вдоль ее оси. В частности, это означает, что взаимодействие частиц друг с другом в цепочке предполагается существенно более сильным, чем их взаимодействие с внешним магнитным полем, причем энергия взаимодействия близко расположенных частиц гораздо больше тепловой энергии kT . Последнее условие является необходимым для появления каких бы то ни было гетерогенных структур в феррожидкости. В работах [44-48, 50, 51] модель прямых стержней привела к оценкам реологических свойств феррожидкостей, согласующимся с результатами экспериментов.

В-третьих, пренебрегается существованием других гетерофазных структур, кроме линейных цепочных агрегатов. В реальности кроме цепочек могут существовать и другие конгломераты феррочастиц (например, кольцевые [54] или капельные [38]), однако в рамках одного исследования все типы гетероструктур учесть невозможно и разумно рассматривать их по отдельности.

В-четвертых, предполагается, что феррожидкость настолько разрежена, что можно пренебречь взаимодействием между цепочками, в том числе взаимодействием одиночных частиц с цепочками и друг с другом. Нужно отметить, что для рассматриваемой задачи, когда образование цепочек приводит к существенному росту вязкости феррожидкости, модель невзаимодействующих цепочек представляется весьма сильным приближением. Однако, математически корректная, или надежно экспериментально апробированная теория, позволяющая учитывать гидродинамические взаимодействия вытянутых частиц (цепочек) отсутствует. В то же время, опыт использования приближения невзаимодействующих

цепочек применительно к задачам о реологических эффектах в магнитных суспензиях разной природы (см., например, [31, 32, 34-36, 55-58]), показывает, что приближение невзаимодействующих агрегатов приводит к разумным совпадениям с экспериментами, по крайней мере, по порядку величины. Это дает основание надеяться, что и при описании нестационарных, релаксационных явлений в полидисперсных средах такой подход позволяет учесть принципиально важные моменты микроскопического формирования макроскопических вязкоупругих явлений в феррожидкостях.

В-пятых, ограничимся анализом систем, для которых энергия магнитодипольного взаимодействия соседних частиц в цепочке существенно больше, чем энергия взаимодействия частицы с магнитным полем.

Стационарное распределение цепочек по размерам. Цепочечные агрегаты являются специфическими гетерогенными флуктуациями плотности. Поэтому число частиц в цепочке является случайной величиной, определяемой конкуренцией между магнитным притяжением частиц, их броуновским движением, гидродинамическими силами, разрывающими цепочку, а также присутствием мелких частиц. В макроскопически неподвижной среде максимальное число частиц в цепочке, теоретически, равно бесконечности. В деформационно движущейся среде слишком длинные цепочки разрываются гидродинамическими силами. Поэтому существует конечное максимальное число n_c частиц в цепочке. Это число может быть определено из баланса сил магнитного притяжения между частицами и гидродинамическими силами, разрушающими цепочку.

В случае если магнитное поле, ориентирующее оси цепей, направлено вдоль градиента скорости потока, n_c было оценено в [31, 32] следующим образом:

$$n_c \propto \sqrt{\varepsilon \frac{D_r}{\dot{\gamma}}}, \quad \varepsilon = \frac{2m^2}{d^3 kT}, \quad D_r = \frac{kT}{\pi\eta_0 d^3}. \quad (59)$$

Здесь d – диаметр большой частицы, m – магнитный момент частицы, D_r – коэффициент вращательной диффузии большой частицы, η_0 – вязкость несущей жидкости. Параметр ε – безразмерная, отнесенная к тепловой энергии kT , энергия магнитодипольного взаимодействия двух контактирующих частиц, $\dot{\gamma}$ – градиент макроскопической скорости течения феррожидкости. В этой работе используется гауссова система единиц, наиболее удобная для анализа магнитных явлений. Оценка (59) была успешно использована в работах

[32, 34-36] (см., также обзоры в [31, 33]) для количественных оценок стационарных магнитовязких эффектов в различных феррожидкостях. Далее, для простоты, принимается оценка (59) для n_c как точное равенство.

Обозначим g_n – число n -частичных цепочек в единице объема среды. Равновесная функция распределения должна соответствовать принципу минимума свободной энергии среды:

$$g_n = \frac{1}{\nu} \frac{\text{sh}(\kappa n)}{\kappa n} X^n \exp(-\varepsilon - w_n), \quad \nu = \frac{\pi d^3}{6}, \quad \kappa = \frac{mH}{kT}, \quad (60)$$

где ν – объем большой частицы; H – магнитное поле; безразмерный параметр κ – отношение энергии взаимодействия частицы с полем к тепловой энергии kT среды; X – неопределенный множитель Ланжевена; w_n – безразмерная свободная энергия взаимодействия между цепочкой, состоящей из n частиц и малыми частицами.

Условие нормировки запишется следующим образом:

$$\sum_{n=1}^{n_c} n g_n = c = \frac{\varphi}{\nu}. \quad (61)$$

Здесь c – полное число больших частиц в единице объема, φ – их объемная концентрация.

Для того чтобы определить X , нужно подставить соотношение (60) в уравнение (61). В результате получаем трансцендентное уравнение относительно X , которое можно решить численно.

Безразмерная свободная энергия w_n взаимодействия между цепочкой и малыми частицами может быть представлена как сумма [15]:

$$w_n = w_n^m + w_n^{st},$$

магнитной w_n^m и стерической w_n^{st} части этого взаимодействия.

Безразмерная свободная энергия магнитного взаимодействия запишется следующим образом (подробности вычислений можно найти в [44]):

$$w_n^m = -\varphi_s (\varepsilon J_1 + \varepsilon^2 y^3 J_2), \quad y = \frac{d_s}{d}. \quad (62)$$

Здесь, d_s – диаметр малых частиц; φ_s – их объемная концентрация. Выражения для J_1 и J_2 даны в Приложении.

Для оценки стерической компоненты w_n^{st} в работе [44] использовались главные идеи приближения Парсонса, которые были успешно применены для описания фазовых переходов в жидких кристаллах. Согласно этой модели стерическую свободную энергию можно представить следующим образом:

$$w_n^{st} = \varphi_s \frac{V_n^{ex}}{v_s} J(\varphi_s), \quad v_s = \frac{\pi d_s^3}{6}, \quad V_n^{ex} = nV_1 - (n-1)V_2,$$

$$V_1 = \frac{\pi}{6} (d_s + d)^3, \quad V_2 = \frac{\pi d_s^2}{2} \left(\frac{d}{2} + \frac{d_s}{3} \right). \quad (63)$$

где V_n^{ex} – исключенный объем, созданный цепочкой для малой частицы; v_s – объем малой частицы; $J(\varphi_s)$ – функция, зависящая только от объемной концентрации малых частиц, и не зависящая от формы и размеров цепочек и малых частиц; V_1 – объем исключенной сферы, созданный одной большой частицей для малой; V_2 – объем перекрывания двух соседних сфер, которые созданы соседними частицами в цепочке.

В работе [44] была предложена следующая оценка функции J :

$$J(\varphi_s) = \frac{1 - \frac{3}{4}\varphi_s}{(1 - \varphi_s)^2}. \quad (64)$$

Этот результат используется и в наших расчетах. Отметим, что в случае малых концентраций φ_s , когда $J = 1$, приближение (63) соответствует регулярному приближению

второго вириального приближения, и, в рамках его применимости, является точным. Множитель J служит для обобщения этого приближения на более концентрированные системы. Обоснование модели (63), (64) дано в работе [44].

Кинетика роста цепочечных агрегатов. Кинетика роста цепочек определяется балансом потока крупных частиц на цепочку и их «испарения» из цепочки за счет теплового движения. Для описания потока этих частиц на цепочку в ниже используются основные идеи модели [49].

При анализе кинетики изменения функции распределения g_n в работах [45, 46, 48, 49] предполагалось, что присоединение крупных частиц происходит только к краевым частицам цепочек. «Испаряются» из цепочек также только краевые частицы. Действительно, поскольку краевая частица слабее связана с цепочкой, чем внутренняя, вероятность ее испарения выше.

В рамках рассматриваемого механизма роста и разрушения цепочек, можно прийти к следующему кинетическому уравнению Смолуховского (см. подробности в [45]):

$$\frac{\partial g_n}{\partial t} = -A g_1 (g_n - g_{n-1}) + B_1 \left(\frac{B_n}{B_{n+1}} g_{n+1} - \frac{B_{n-1}}{B_n} g_n \right), \quad n > 1. \quad (65)$$

Здесь A это коэффициент захвата частиц цепочкой:

$$A = \frac{4\pi D_0 d}{W}, \quad W = \int_1^\infty \frac{\exp(\bar{u}_{dd})}{\psi(x) x^2} dx, \quad (66)$$

D_0 – коэффициент диффузии изолированной частицы; $\psi(r) = 1 - 3d/4r$ – поправка, вызванная гидродинамическим взаимодействием между свободной и фиксированной частицами [59] величина; \bar{u}_{dd} является значением безразмерной энергии u_{dd} , усредненной по области притяжения между цепочкой и свободной частицей:

$$\bar{u}_{dd} = -\frac{\varepsilon}{3\sqrt{3}x^3}, \quad (67)$$

$x = r/d$ – безразмерное расстояние между свободной частицей и концевой частицей цепочки. В уравнении (65) B_n – коэффициенты, определяющие интенсивность десорбции

частиц из цепочки. Эти коэффициенты будут оценены ниже. Выражения (8,9) были получены ранее в работе [49].

Уравнение для g_1 имеет следующую форму [45]:

$$\frac{\partial g_1}{\partial t} = -2Ag_1^2 - Ag_1 \sum_{n=2}^{n_c-1} g_n + 2\frac{B_1^2}{B_1} g_2 + B_1 \sum_{n=3}^{n_c} \frac{B_{n-1}}{B_n} g_n. \quad (68)$$

Уравнения, аналогичные (65), (68), были использованы в работе [49]. Для числа цепочек с максимально возможным числом частиц n_c можно написать [45]:

$$\frac{\partial g_{n_c}}{\partial t} = Ag_{n_c-1}g_1 - B_1 \frac{B_{n_c-1}}{B_{n_c}} g_{n_c}. \quad (69)$$

Система уравнений (65), (68), (69) является замкнутой, и автоматически удовлетворяет следующему условию:

$$\sum_{n=1}^{n_c} ng_n = C,$$

где C – постоянная величина. Из физических соображений следует, что она должна быть равной общей концентрации φ/ν крупных частиц в суспензии.

Сейчас мы определим коэффициенты десорбции B_n . Очевидно, стационарное решение g_n^0 системы уравнений (65), (68), (69), соответствует равновесному состоянию системы, следовательно, должно совпадать с равновесной функцией распределения, найденной из соображений минимума свободной энергии. Можно легко проверить, что стационарным решением (65), (68), (69) является:

$$g_n^0 = \frac{B_n}{A} Y^n, \quad (70)$$

где Y – неопределенный параметр.

Приравнивая соотношения (60) и (70), получаем:

$$Y = X, B_n = \frac{A \operatorname{sh}(\kappa n)}{\nu \kappa n} \exp(-\varepsilon - w_n).$$

Способ вычисления параметра X указан выше, после уравнения (61).

Система уравнений (65), (68), (69) с соответствующими начальными условиями может быть решена численно.

Вязкоупругие свойства магнитной жидкости. В этой части работы кратко изложены результаты модели динамики эффективной вязкости феррожидкости с цепочечными агрегатами, учитывающую кинетику их роста.

Как и в работах [32, 45-48, 50, 52] предполагается, что изменение ориентации цепочек при изменении магнитного поля или градиента скорости течения происходит мгновенно. Это приближение обосновывается тем, что характерное время переориентации цепочки много меньше времени изменения функции g_n [45-47].

Как и в [32, 50, 51] будем моделировать цепочку, состоящую из n частиц, вытянутыми эллипсоидами вращения с малой и большой осью, равными диаметру частицы d и nd соответственно. Принципиально важно, что объем такого эллипсоида равен суммарному объему $\pi nd^3/6$ всех частиц в цепочке. Следовательно, объемная концентрация эллипсоидов равна объемной концентрации частиц в феррожидкости.

Введем декартовую систему координат x, y, z , ось Oz которой параллельна внешнему магнитному полю ($H_z = H = \text{const}$, $H_{x,y} = 0$). Рассмотрим случай, когда скорость феррожидкости направлена вдоль оси Ox с градиентом, направленным вдоль Oz (т.е. вдоль внешнего поля \mathbf{H}).

Тогда, используя известные результаты статистической гидромеханики суспензий неферрических частиц [60], а также результаты работ [32, 45-48, 50, 52], выражение для эффективной вязкости системы можно написать следующим образом:

$$\eta = \eta_0 \left[1 + \left\langle \left\langle \alpha_n + \frac{1}{2} \left[(\zeta_n + \beta_n \lambda_n) \left(\langle e_x^2 \rangle_n^0 + \langle e_z^2 \rangle_n^0 \right) + \beta_n \left(\langle e_z^2 \rangle_n^0 - \langle e_x^2 \rangle_n^0 \right) + 2(\chi_n - 2\lambda_n \beta_n) \langle e_x^2 e_z^2 \rangle_n^0 \right] + \frac{1}{2\nu} \frac{\kappa k T}{\eta_0} \left(A_1 \langle e_x^2 \rangle_n^0 + B_1 \langle e_x^2 e_z^2 \rangle_n^0 \right) \right\rangle \right] \right],$$

$$A_1 = \frac{a_x}{2\dot{\gamma}}, B_1 = \frac{b_{xz}}{\dot{\gamma}}. \quad (71)$$

где

$$\langle\langle\ldots\rangle\rangle = \sum_{n=1}^{n_c} \ldots n \nu g_n, \langle\ldots\rangle^0 = \int \ldots \mathbf{e} \phi_n^0(\mathbf{e}) d\mathbf{e}.$$

Единичный вектор \mathbf{e} направлен вдоль оси цепочки, ϕ_n^0 – равновесная, нормированная к единице функция распределения по \mathbf{e} . Коэффициенты a_x и b_x можно получить, решив систему уравнений (71):

$$\begin{aligned} & \left[\left(\frac{1}{\tau_{1n}} \right) \langle e_x^2 \rangle_n^0 + D_n \kappa n \langle e_x^2 e_z \rangle_n^0 \right] a_x + \left[\left(\frac{1}{\tau_{1n}} \right) \langle e_x^2 e_z \rangle_n^0 + D_n \kappa n \langle e_x^2 e_z^2 \rangle_n^0 \right] 2b_{xz} = \\ & = \left[\lambda_n \left(\langle e_z \rangle_n^0 - 2 \langle e_x^2 e_z \rangle_n^0 \right) + \langle e_z \rangle_n^0 \right] \dot{\gamma}, \\ & \left[\left(\frac{1}{\tau_{2n}} \right) \langle e_x^2 e_z \rangle_n^0 + D_n \kappa n \left(2 \langle e_x^2 e_z^2 \rangle_n^0 - \langle e_x^2 \rangle_n^0 \right) \right] a_x + \left[\left(\frac{1}{\tau_{2n}} \right) \langle e_x^2 e_z^2 \rangle_n^0 + D_n \kappa n \left(2 \langle e_x^2 e_z^3 \rangle_n^0 - \right. \right. \\ & \left. \left. - \langle e_x^2 e_z \rangle_n^0 \right) \right] 2b_{xz} = \left[\lambda_n \left(\langle e_x^2 \rangle_n^0 - 4 \langle e_x^2 e_z^2 \rangle_n^0 + \langle e_x^2 \rangle_n^0 \right) + \langle e_z^2 \rangle_n^0 - \langle e_x^2 \rangle_n^0 \right] \dot{\gamma}. \end{aligned} \quad (72)$$

Здесь:

$$D_n = \frac{kT}{\pi \eta_0 d^3 n \delta_n}, \tau_{1n} = \frac{1}{2D_n}, \tau_{2n} = \frac{1}{6D_n}.$$

Параметры α_n , β_n , δ_n , ζ_n , λ_n , χ_n , а также равновесные моменты определены и даны в приложении, D_n имеет смысл коэффициента вращательной диффузии n -частичной цепочки.

Определив функцию распределения по числу частиц в цепочке g_n из уравнений (65), (68), (69) и используя результат в соотношении (71), находим зависимость эффективной вязкости η от времени. Рис. 7-10 иллюстрируют зависимость η от времени при ступенчатых изменениях скорости сдвига. Характеристики феррожидкости, выбранные для расчетов, близки к характеристикам феррожидкости TTR , используемой в экспериментах [34].

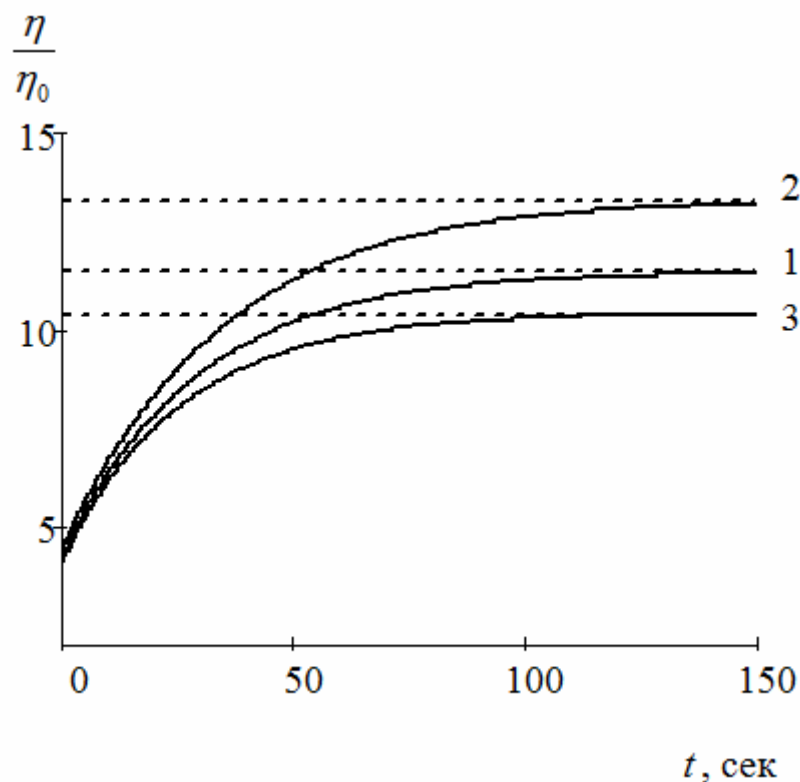


Рисунок 7 — Зависимость эффективной вязкости магнитной жидкости от времени t в результате кинетики роста цепочек. По вертикальной оси отложена величина η/η_0 — безразмерная относительная вязкость системы, $y = d_s/d$ — отношение диаметров мелких и крупных частиц. Сплошные линии означают динамическое изменение вязкости, штрихпунктирные — равновесное значение вязкости. Объемная доля крупной фракции частиц $\varphi = 0,015$; объемная доля мелкой фракции частиц $\varphi_s = 0,008$; вязкость несущей жидкости $\eta_0 = 0,013$ Па·сек; диаметр крупных частиц $d = 16$ нм; $\varepsilon = 5,5$. Отношение $\dot{\gamma}/D_r$ меняется от $7 \cdot 10^{-3}$ до $7 \cdot 10^{-4}$. Безразмерное магнитное поле $\kappa = 3$. Цифры у кривых: 1 — примеси отсутствуют, рассчитанное время релаксации $\tau_1 = 28,5$ сек; 2 — относительный размер мелких частиц $y = 0,1$, время релаксации $\tau_2 = 33,4$ сек; 3 — $y = 0,5$, время релаксации $\tau_3 = 25,5$ сек.

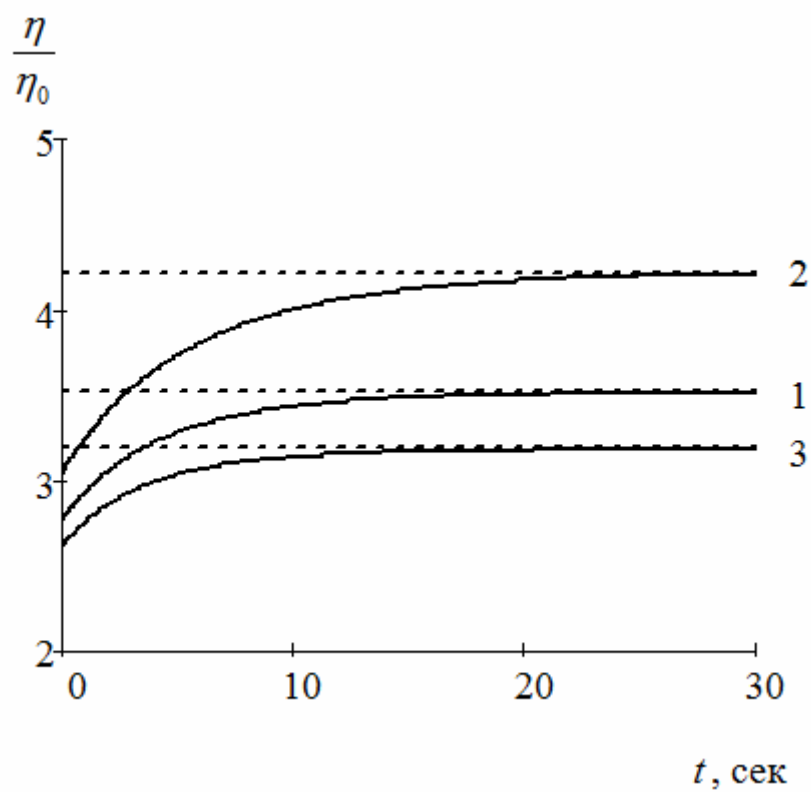


Рисунок 8 — То же, что на рис. 1, отношение $\dot{\gamma}/D_r$ меняется от $7 \cdot 10^{-3}$ до $7 \cdot 10^{-4}$. Безразмерное магнитное поле $\kappa = 1$. Цифры у кривых: 1 — примеси отсутствуют, время релаксации $\tau_1 = 4,3$ сек; 2 — относительный размер мелких частиц $y = 0,1$, $\tau_2 = 5,7$ сек; 3 — $y = 0,5$, $\tau_3 = 3,6$ сек.

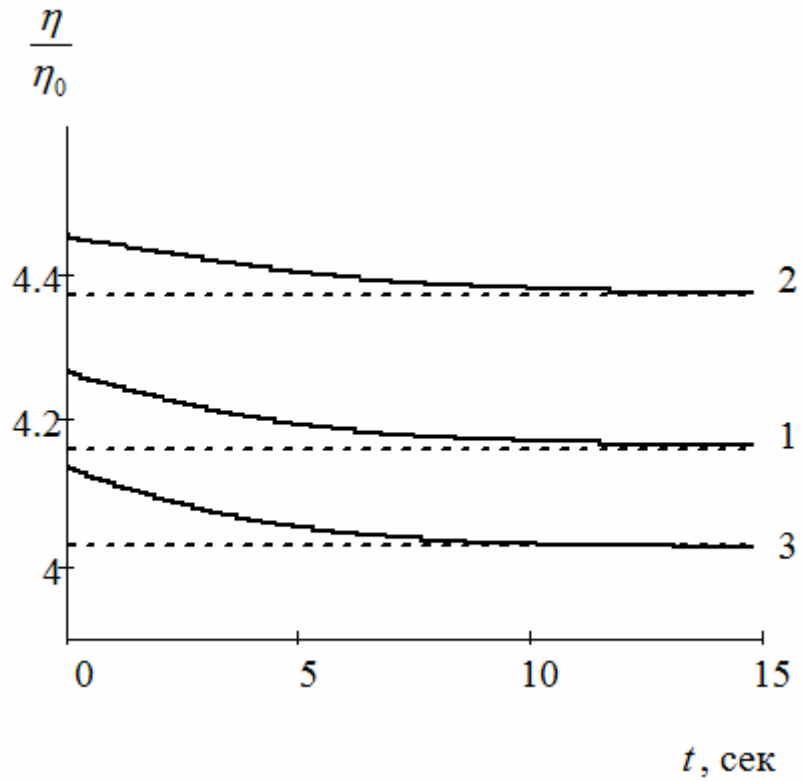


Рисунок 9 — То же, что на рис. 1, отношение $\dot{\gamma}/D_r$ меняется от $7 \cdot 10^{-4}$ до $7 \cdot 10^{-3}$. Безразмерное магнитное поле $\kappa = 3$. Цифры у кривых: 1 – примеси отсутствуют, время релаксации $\tau_1 = 3,5$ сек; 2 – относительный размер мелких частиц $y = 0,1$, $\tau_2 = 4,3$ сек; 3 – $y = 0,5$, $\tau_3 = 3,1$ сек.

Из-за магнитного взаимодействия больших и малых частиц, последние стремятся разместиться ближе к полюсам больших частиц. Таким образом, чем больше свободных полюсов у больших частиц в системе, тем термодинамически выгоднее ситуация для магнитного состояния малых частиц. Очевидно, этот фактор разрушает цепочки. Наоборот, объединение больших частиц в цепочки уменьшает общий исключенный объем для малых частиц, созданный большими частицами. Это объединение увеличивает энтропию малых частиц и, поэтому, выгодно для их термодинамического состояния. Таким образом, стерическое взаимодействие между большими и малыми частицами приводит к увеличению длины цепочек. Влияние малых частиц на размеры цепочек проявляется в результате конкуренции магнитного и стерического взаимодействия между цепочками и малыми частицами. Если доминирует магнитное взаимодействие, то длина цепочек, благодаря присутствию мелких частиц, уменьшается. В противоположном случае – увеличивается. Очевидно, чем меньше отношение d_s/d размеров малых и больших частиц, тем слабее эффект магнитного взаимодействия и сильнее эффект стерического.

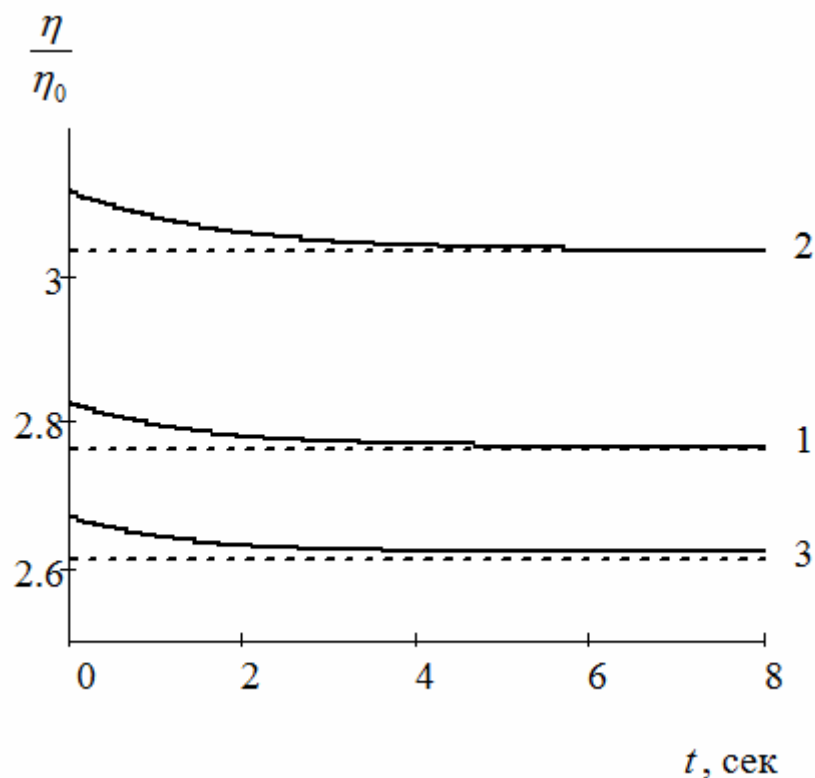


Рисунок 10 — То же, что на рис. 1, отношение $\dot{\gamma}/D_r$ меняется от $7 \cdot 10^{-4}$ до $7 \cdot 10^{-3}$. Безразмерное магнитное поле $\kappa = 1$. Цифры у кривых: 1 – примеси отсутствуют, время релаксации $\tau_1 = 1,2$ сек; 2 – относительный размер мелких частиц $y = 0,1$, $\tau_2 = 1,4$ сек; 3 – $y = 0,5$, $\tau_3 = 1,1$ сек.

Как видно из рис. 7-10, присутствие малых частиц может по-разному влиять на вязкость феррожидкости. При $y = 0,1$ доминирует стерическое взаимодействие над магнитным, поэтому присутствие малых частиц способствует росту цепочек, а, следовательно, и увеличению вязкости. При $y = 0,5$, наоборот, доминирует магнитное взаимодействие над стерическим, поэтому длина цепочек и вязкость системы уменьшается. Эта закономерность справедлива при различном внешнем магнитном поле и при различной скорости сдвига.

Если за характерное время релаксации вязкости выбрать время τ , за которое разность между начальным и конечным значениями вязкости уменьшается в $e \approx 2,72...$ раз, то, как видно из подписей к рис. 7-10, присутствие малых частиц может также по-разному влиять на время релаксации. При $y = 0,1$ время релаксации становится больше по сравнению с приближением, в котором мелкие частицы игнорируются. При $y = 0,5$, наоборот, время релаксации уменьшается. Как было отмечено выше, чем меньше размер малых частиц, тем

больше длина цепочек, а значит и время релаксации будет больше, т.к. эволюция ансамбля длинных цепей требует большего времени, чем коротких.

Реология композиционных феррожидкостей с кластерными частицами

В стандартных феррожидкостях сильные магнитореологические эффекты наблюдаются только при малых скоростях сдвига. В магнитореологических суспензиях микронных намагничивающихся частиц сильные реологические эффекты наблюдаются в широком диапазоне скоростей сдвига, но эти суспензии неустойчивы по отношению к седиментации частиц. Массивные неброуновские частицы таких суспензий довольно быстро оседают на дно содержащего их контейнера, что ухудшает технологические свойства суспензий. Поэтому возникает идея синтеза магнитных жидкостей, которые сочетали бы в себе седиментационную устойчивость феррожидкостей с сильными магнитореологическими свойствами. Оценки показывают, что системы с частицами диаметром около 100 нм удовлетворяют этим условиям.

В работе [60] сообщается о синтезе и исследовании свойства разбавленной магнитной жидкости, состоящей из кластеров наночастиц оксида железа. Объемная доля частиц φ в этих системах была мала, около 0,1%. Схематическое представление магнитных кластеров показано на рис. 11. Каждый кластер состоит из плотной системы наночастиц оксида железа, распределенной в оболочке полимера (см. детали и фотографии кластеров в [61]). Наночастицы формируют магнитное ядро кластера, который окружен оболочкой чистого полимера. Кластеры имеют неправильную форму и широкий диапазон распределения по размерам. Средний диаметр кластера с полимерной оболочкой равен примерно 80-100 нм, размер магнитного ядра равен приблизительно 50-70 нм.

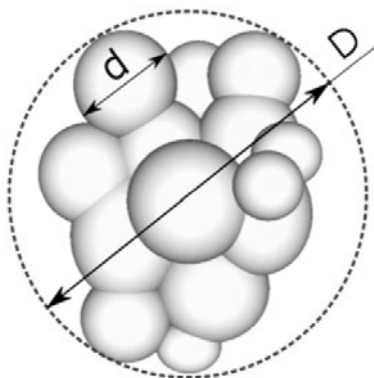


Рисунок 11 — Схематическое представление магнитного кластера: диаметр зерен $d = 10-30$ нм; размер кластера $D = 50-70$ нм.

Цель этой части – теоретическое исследование магнитовязкого эффекта в таких системах, а также релаксации вязкого напряжения, после ступенчатого изменения скорости сдвигового течения.

Эксперименты. Для измерений реологических свойств феррожидкости использовался сдвиговый реометр с геометрией в виде конуса. Угол раствора конуса $\theta = 3^\circ$ и его радиус $R = 38$ мм. Устройство и принцип работы реометра можно найти в [35]. Эксперименты были выполнены следующим образом. Сначала жидкость находится в покое и магнитное поле H приложено параллельно вращающейся оси реометра. После 15 минут в момент времени $t = 0$ внезапно прикладывается скорость сдвига $\dot{\gamma} > 0$. Сдвиговое напряжение τ и его изменение во времени были получены измерением момента сил T в конусе.

Сдвиговое напряжение σ может быть вычислено следующим образом:

$$\sigma = \frac{3T}{2\pi R^3}.$$

Для экспериментальной установки была использована ньютоновская жидкость, временной отклик которой составляет менее 1 сек.

Рисунок 12 иллюстрирует эффект приложенного магнитного поля на релаксацию напряжения при $\dot{\gamma} = 0,2 \text{ сек}^{-1}$, рис. 13 – влияние скорости сдвига на релаксацию напряжения для магнитного поля $H = 30 \text{ кА/м}$.

При $H = 0$, σ мгновенно достигает своего равновесного состояния. В присутствии магнитного поля напряжение σ быстро растет со временем, достигает максимума, уменьшается, снова растет и достигает равновесного состояния. При уменьшении скорости сдвига максимум будет менее явный и релаксация напряжения в конечном итоге станет монотонной. С увеличением скорости сдвига пик максимума становится более отчетливым и узким. Зависимость времени, при котором имеет место максимум, от магнитного поля не исследовалась. С другой стороны время, пока напряжение в жидкости не станет равновесным, зависит как от скорости сдвига, так и от магнитного поля, и может достигать нескольких минут.

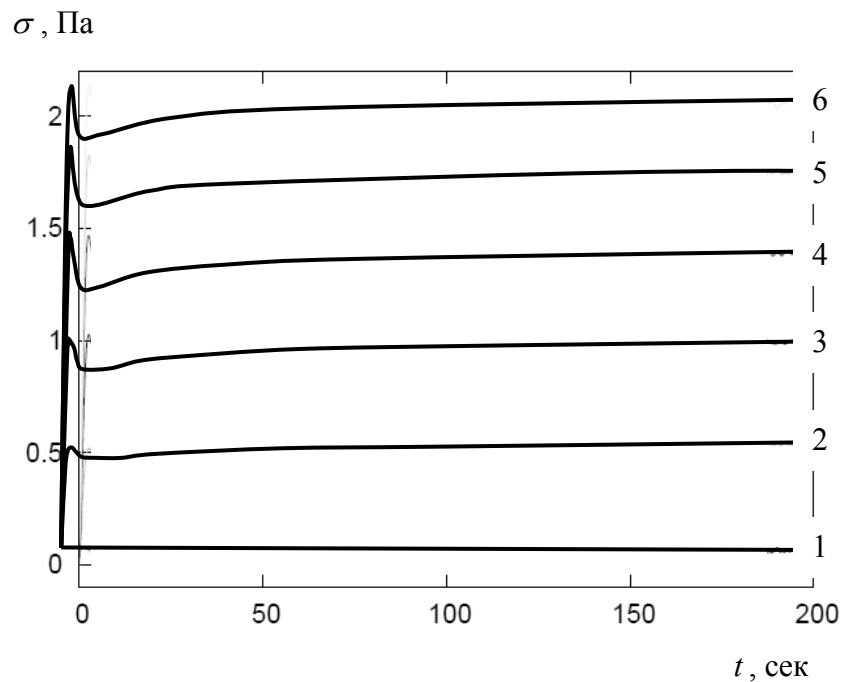


Рисунок 12 — Релаксация сдвигового напряжения для различного магнитного поля после скачкообразного изменения скорость сдвига от 0 до $0,2 \text{ сек}^{-1}$ (эксперимент). Цифры у кривых: 1 – $H = 0$; 2 – $H = 10 \text{ кА/м}$; 3 – $H = 15 \text{ кА/м}$; 4 – $H = 20 \text{ кА/м}$; 5 – $H = 25 \text{ кА/м}$; 6 – $H = 30 \text{ кА/м}$.

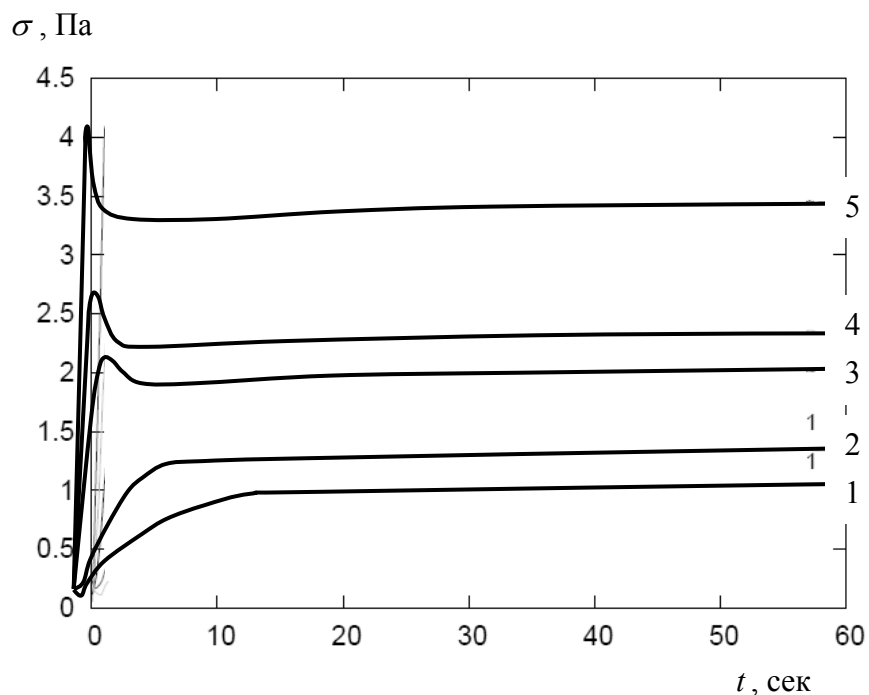


Рисунок 13 — Релаксация сдвигового напряжения для магнитного поля $H = 30 \text{ кА/м}$ после различного скачкообразного изменения скорость сдвига (эксперимент). Цифры у кривых: 1 – скорость сдвига изменяется от 0 до $0,02 \text{ сек}^{-1}$; 2 – скорость сдвига изменяется от 0 до $0,04 \text{ сек}^{-1}$; 3 – скорость сдвига изменяется от 0 до $0,2 \text{ сек}^{-1}$; 4 – скорость сдвига изменяется от 0 до $0,4 \text{ сек}^{-1}$; 5 – скорость сдвига изменяется от 0 до 2 сек^{-1} .

Эксперименты, выполненные на ньютоновских жидкостях (например, силиконовое масло M100 с $\eta \sim 100$ мПа·сек) и феррожидкостях без значительного магнитовязкого эффекта (APG513A, изготовленной Ferrotec, $\eta \sim 120$ мПа·сек), показывают, что максимум и последующая релаксация σ не обусловлены ни инерцией жидкости, ни влиянием, вызванным недостатком жесткости реометра.

Наблюдаемое поведение с максимумом также известно из реологии эласто-тиксотропных жидкостей (жидкости, способные уменьшать вязкость от механического воздействия и увеличивать вязкость в состоянии покоя), таких как эмульсия креозота [62], человеческая кровь [63] или полимерные растворы. Вид максимума зависит от модуля вязкоупругости, который в свою очередь зависит от скорости сдвига.

Что касается феррожидкостей, то в них цепочные структуры формируются благодаря межчастичному взаимодействию под влиянием внешнего магнитного поля. После того, как жидкость была подвергнута сдвигу, число и размер цепочек уменьшается до тех пор, пока не будет достигнута состояние равновесия. Начальная стадия неравновесного процесса зависит от величины приложенной скорости сдвига. Монотонный рост напряжения на рис. 12, 13 при умеренной скорости сдвига объясняется тем, что экспериментальный масштаб времени достаточно большой. Для высокой скорости сдвига релаксация напряжения не может быть достигнута, так как масштаб времени слишком мал. Время релаксации определяется совместным действием магнитных и механических сил.

Чтобы проанализировать влияние магнитного поля на время неравновесного состояния, было рассмотрено отношение между неравновесной вязкостью η_T , т.е. вязкостью при $t = 1/\dot{\gamma}$, и стационарной вязкостью η_{eq} при $t \rightarrow \infty$. Для каждого магнитного поля была получена зависимость $\eta_T(1/\dot{\gamma})$ от η_{eq} . В качестве примера эта зависимость показана на рис. 14 для $H = 30$ кА/м.

Экспериментальные данные были линеаризованы для каждой величины магнитного поля. Была получена зависимость η_T/η_{eq} от магнитного поля (рис. 11). Для силы магнитного поля ниже 15 кА/м наблюдается медленный релаксационный процесс. Как видно из рис. 15, для этих полей расхождение результатов получается довольно большое, т.к. сила магнитного поля мала, а значит и взаимодействие между кластерами достаточно слабое.

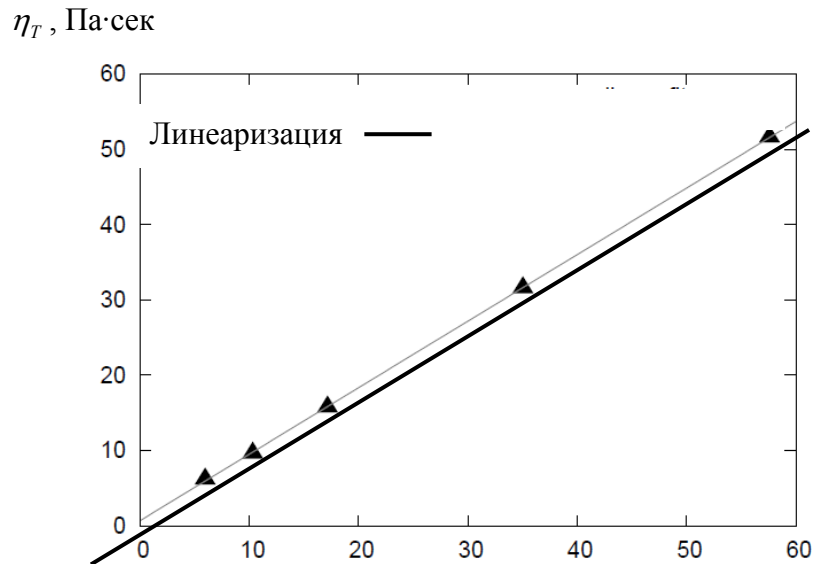


Рисунок 14 — Нестационарная вязкость $\eta_T(1/\dot{\gamma})$ как функция η_{eq} , Па·сек от равновесной вязкости η_{eq} при $H = 30$ кА/м.

Для сильного магнитного поля ($H > 15$ кА/м) равновесное состояние достигается быстрее, и функция η_T/η_{eq} стремится к насыщению. Здесь доминирует взаимодействие между кластерами частиц, которое индуцировано магнитным полем. Насыщение может быть объяснено вследствие ограниченного количества магнитного материала в жидкости (объемная доля $\varphi = 0,001$).

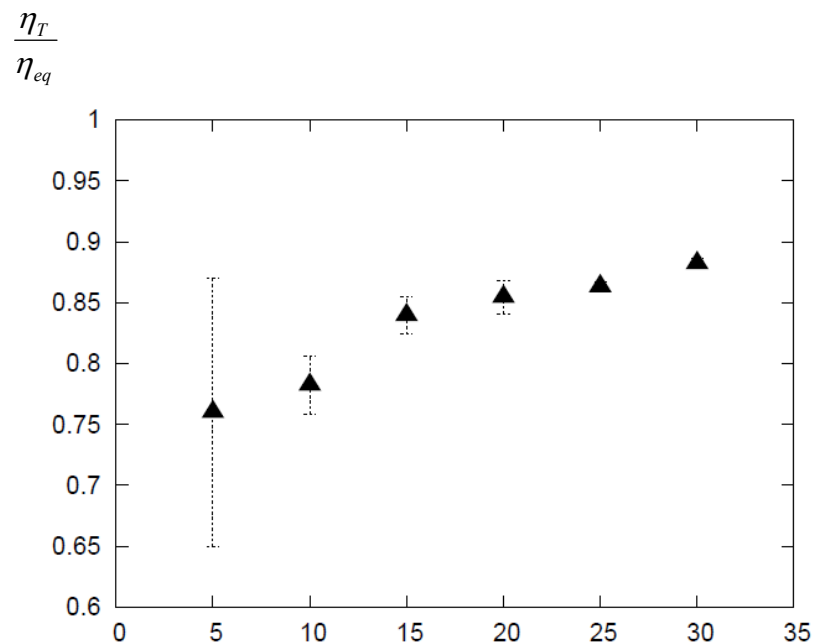


Рисунок 15 — Отношение $\eta_T(1/\dot{\gamma})/\eta_{eq}$ как функция приложенного магнитного поля H , кА/м.

Теория. Не существует теоретического метода описания поведения ансамбля полидисперсных кластеров с неправильными формами. Для максимального упрощения анализа здесь рассматривается модель системы идентичных сферических кластеров, которые проиллюстрированы на рис. 16.

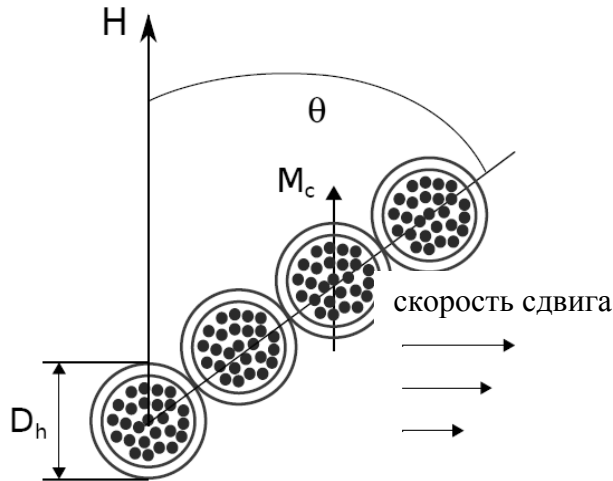


Рисунок 16 — Схематическое изображение цепочки, состоящей из кластеров.

В первом приближении магнитный момент M_c кластеров можно оценить, используя следующую формулу:

$$M_c = N_p m_p L \left(\frac{\mu_0 m_p H}{kT} \right),$$

где N_p – число наночастиц в магнитном ядре кластера; m_p – магнитный момент частицы. Строго говоря, H здесь – магнитное поле внутри кластера. Это внутреннее поле не может быть вычислено для реальных кластеров с неправильной формой. Вычисление этого поля в сферической модели слишком громоздко и приводит к неконтролируемому расхождению между расчетным полем и полем внутри реального кластера. Именно поэтому, для максимального упрощения, с целью получения простейших оценок, поле H ассоциируется с усредненным полем в феррожидкости. Так как концентрация φ ферромагнитных частиц в представленном случае мала, поле внутри феррожидкости примерно равно внешнему приложенному полю.

Закон Ланжевена для намагничивания ансамбля ферромагнитных частиц является достаточно точным, когда концентрация частиц мала и магнитное взаимодействие между ними пренебрежимо мало. Хорошо известно, что формула Ланжевена недооценивает намагниченность концентрированных систем взаимодействующих феррочастиц. Тем не менее, чтобы избежать громоздкой оценки вязкости феррожидкости, для намагниченности ядра кластера мы используем простейший закон Ланжевена.

Число N_p наночастиц в кластере может быть оценено как:

$$N_p \propto \varphi_p \nu_p V_m,$$

где φ_p – объемная концентрация частиц в магнитном ядре кластера; ν_p – объем наночастиц; V_m – объем кластерного магнитного ядра. Фотографии кластера [61] демонстрируют плотное расположение наночастиц в ядре. Это позволяет использовать оценку $\varphi_p \approx 0,5 - 0,6$.

Установлено, что сильные магнитовязкие эффекты в магнитных суспензиях могут быть объяснены появлением гетерогенных структур, состоящих из взвешенных частиц (кластеров, в данном случае). Здесь предполагается, что наблюдаемые реологические явления вызваны линейными цепочками, состоящих из композитных кластеров. Оценки показывают, что взаимодействие между намагниченными кластерами и приложенным полем H значительное сильнее, чем взаимодействие между кластерами в цепочке. Именно поэтому, как и во многих моделях цепочек в магнитных суспензиях (см. обзор в [57]), предполагается, что магнитный момент кластера M_c в цепочке равен моменту отдельного кластера. Другими словами, пренебрегается влиянием магнитного взаимодействия кластеров на их магнитные моменты.

Анализ магнитовязкого эффекта в феррожидкости с намагничивающимися кластерами основан на идее [54, 64]. Рассмотрим цепочку, состоящую из намагничивающихся кластеров, в которых магнитные моменты направлены вдоль приложенного поля (см. рис. 16). Найдем функцию распределения числа кластеров в цепочке.

Отметим, что в предыдущих главах предполагалось, что магнитные моменты частиц, составляющих цепочки, направлены вдоль оси цепочки. Это приближение оправдано для частиц с постоянными собственными магнитными моментами, когда взаимодействие между частицами сильнее их взаимодействия с магнитными полем. В случае цепочки, состоящей из

намагничивающихся частиц, более оправдано приближение, в котором моменты частиц направлены вдоль поля.

Для максимального упрощения анализа, как и в предыдущих главах, пренебрежем любыми термическими флуктуациями формы цепочки. Как было показано в предыдущих главах, даже для жидкостей размер частиц в которых имеет порядок величины 10-20 нм, такое приближение позволяет получать разумные оценки реологических свойств этих систем. Оно тем более оправдано для цепочек, составленных из рассматриваемых кластеров, для которых броуновское движение выражено слабее, чем для мелких однодоменных частиц.

В рамках этих приближений радиальная (вдоль оси цепочки) компонента F_r^m магнитной силы между двумя ближайшими частицами может быть оценена как:

$$F_r^m = -3\lambda \frac{kT}{D_h} (3\cos^2 \theta - 1),$$

где

$$\lambda = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{M_c^2}{D_h^3 kT}.$$

Здесь D_h – гидродинамический диаметр кластера. Вычисления показывают, что $\lambda \approx 2,3$.

Потенциальная энергия U_n цепочки, состоящей из n частиц, в магнитном поле может быть представлена как:

$$U_n = -(n-1)kT\lambda(3\cos^2 \theta - 1).$$

Здесь опускаются другие члены для U_n , которые незначительны для дальнейшего анализа.

Магнитный вращающий момент, который стремится выровнять ось цепочки с направлением магнитного поля, запишется:

$$\Gamma_n^m = -\frac{\partial U_n}{\partial \theta} = -6\lambda kT(n-1)\sin \theta \cos \theta.$$

Анализ показывает, что гидродинамическая разрушающая сила максимальна вблизи середины цепочки. Радиальная (т.е. вдоль оси цепочки) компонента F_r^h этой силы, действующей вблизи центра цепочки, может быть оценена как [54, 64]:

$$F_r^h = \dot{\gamma} \beta D_h \frac{\nu(\nu+1)}{2} \sin \theta \cos \theta,$$

$$\beta = 3\pi\eta_0 D_h, \quad \nu = \frac{n-1}{2}.$$

Гидродинамический момент Γ_n^h , который стремится отклонить цепочку от магнитного поля, приближенно может быть представлен в следующей форме [54, 64]:

$$\Gamma_n^h = \frac{1}{3} \dot{\gamma} \beta D_h^2 \cos^2 \theta \nu (2\nu^2 + 3\nu + 1).$$

Приравнивая магнитный момент Γ_n^m к гидродинамическому моменту Γ_n^h , магнитную притягивающую силу F_r^m к гидродинамической разрушающей силе F_r^h , приходим к системе уравнений относительно угла θ и числа n . Решение этой системы дает угол отклонения θ_n цепочки, состоящей из n кластеров и максимальное число n_c кластеров в неразрушенной цепочке.

Обозначим число цепочек, состоящих из n кластеров в единице объема системы как g_n . Функция распределения g_n в состоянии равновесия намагниченных частиц была оценена в [64] при использовании условия минимума свободной энергии системы по отношению к g_n . Строго говоря, теорема минимума свободной энергии не справедлива для системы, подверженной сдвиговому течению. Однако, анализ [64] показал, что эта теорема может быть применена к ансамблю цепочек, когда конвективное движение частиц (кластеров) вблизи цепочек слабее, чем их диффузионное движение.

Повторяя выкладки [64], получаем:

$$g_n = \frac{1}{V_h} X^n \exp((n-1)\lambda \cos^2 \theta_n - 1),$$

$$V_h = \frac{\pi D_h^3}{6}.$$

Здесь X – множитель Лагранжа, который определяется из условия нормировки:

$$\sum_{n=1}^{n_c} n g_n = \frac{\Phi_h}{V_h},$$

где Φ_h – гидродинамическая объемная концентрация кластеров.

Некоторые результаты вычислений функции распределения g_n показаны на рис. 17.

Представленные результаты показывают, что большинство цепочек, приблизительно, состоят из максимального числа частиц $n_c(\dot{\gamma}, H)$ и почти все кластеры агломерированы в эти цепочки.

Используя те же самые выкладки, как и в [64], полное макроскопическое сдвиговое напряжение в суспензии можно представить как:

$$\sigma = \sigma^s + \sigma^a,$$

где

$$\sigma^a = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{n_c} \Gamma_n^m g_n,$$

$$\begin{aligned} \sigma^s = \eta_0 \dot{\gamma} + \eta_0 \sum_{n=1}^{n_c} \left[\alpha_n + \frac{1}{2} (\zeta_n + \beta_n \lambda_n) + \frac{1}{2} \beta_n \cos^2 \theta_n + \right. \\ \left. + (\chi_n - 2\beta_n \lambda_n) \sin^2 \theta_n \cos^2 \theta_n \right] n g_n, \end{aligned}$$

Здесь параметры α_n , β_n , ζ_n , χ_n , λ_n определены и даны в приложении, η_0 – вязкость несущей жидкости.

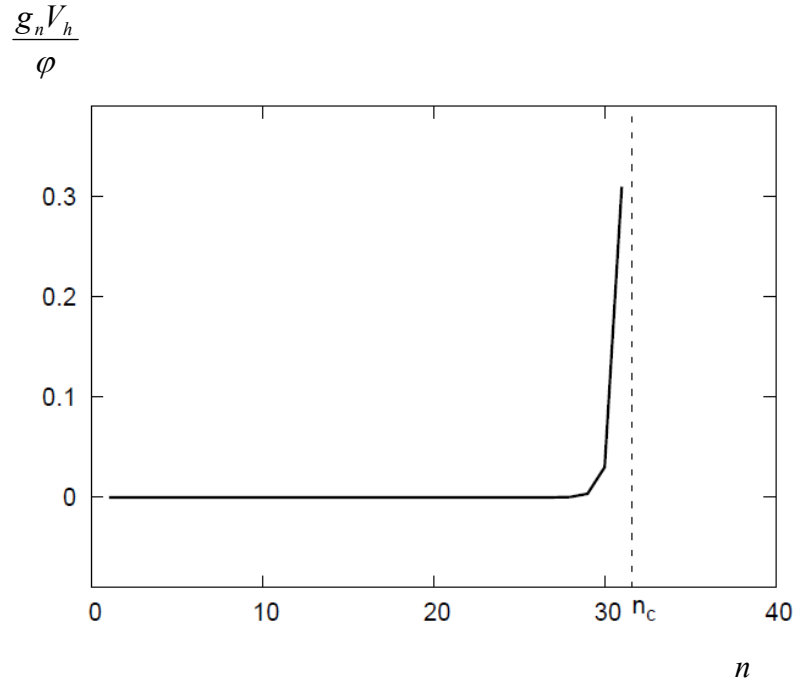


Рисунок 17 — Зависимость функции распределения g_n от числа n кластеров в цепочке. $H = 30$ кА/м; $\dot{\gamma} = 2$ сек $^{-1}$; $D_h = 90$ нм; $\lambda = 2,3$.

Экспериментальные и теоретические результаты стационарного магнитовязкого эффекта при различных скоростях сдвига показаны на рис. 18.

По порядку величины теоретические результаты совпадают с результатами измерений. Однако стоит отметить, что в экспериментах вязкость η увеличивается быстрее с магнитным полем H , чем в представленной модели. Это различие между теорией и экспериментом может быть объяснено тем, что самый простой закон Ланжевена недооценивает зависимость намагниченности кластера от магнитного поля H . Очевидно, магнитное взаимодействие между кластерами в реальной цепочке должно привести к некоторому увеличению магнитного момента кластера M_c .

Неправильная форма кластеров влияет на величину магнитного момента M_c также как и на энергию магнитного взаимодействия между ними. Обобщение самой простой модели Ланжевена, которая учитывает взаимодействие наночастиц в кластере и магнитное взаимодействие между кластерами, дает более быстрый рост вязкости η с полем по сравнению с простой моделью. Однако окончательные результаты и вычисления станут более громоздкими.

В предложенной модели эффективная вязкость уменьшается со скоростью сдвига быстрее, чем в экспериментах. Теоретическая зависимость приблизительно может быть представлена как:

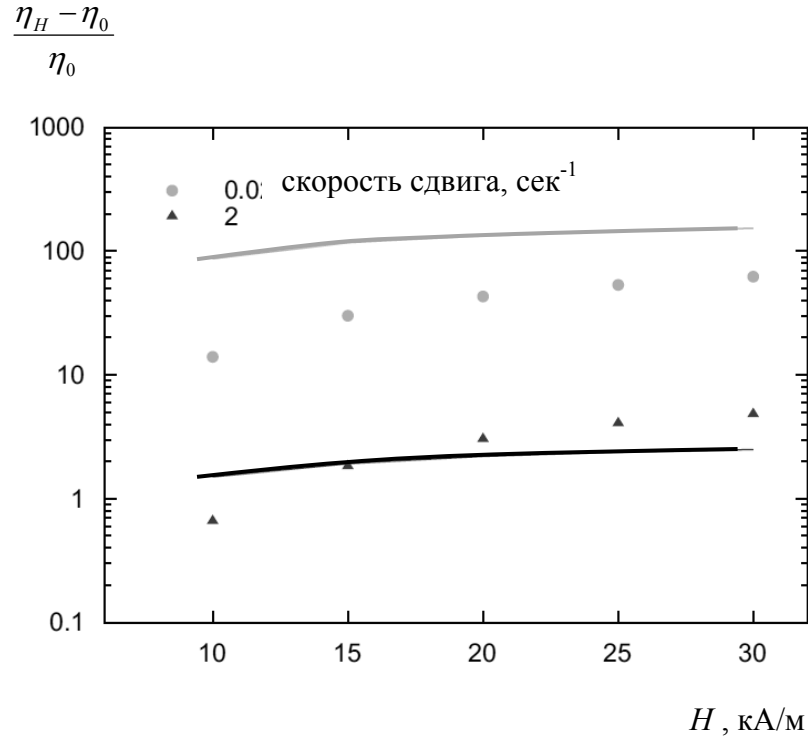


Рисунок 18 — Сопоставление теоретической и экспериментальной зависимости вязкости магнитной жидкости от магнитного поля при различной скорости сдвига. Сплошные линии – теоретические результаты, точки – опытные данные. Гидродинамический диаметр кластера $D_h = 90$ нм; безразмерная энергия диполь-дипольного взаимодействия между кластерами $\lambda = 2,3$.

$$\eta_H \propto \dot{\gamma}^{-\Delta}, \Delta \approx 1,$$

тогда как экспериментальная зависимость может быть записана:

$$\eta_H \propto \dot{\gamma}^{-\Delta}, \Delta \approx \frac{1}{3}.$$

Зависимость с $\Delta \approx 1$ типична для суспензий с намагничивающимися частицами, когда броуновские эффекты пренебрежимо малы [31, 54]. Анализ [64] показывает, что броуновские явления уменьшают экспоненту Δ , также как и эффективную вязкость η_H . Однако, в изученной системе броуновские эффекты слабы. Физическая природа экспериментального медленного уменьшения η_H с $\dot{\gamma}$ остается неясной.

Теперь вернемся еще раз к рис. 12, 13. Самая интересная особенность здесь это пики максимумов и минимумов. Предлагается качественное объяснение этих эффектов.

Предположим, что в начальный момент времени $t = 0$ скорость сдвига увеличивается от $\dot{\gamma}_1$ до $\dot{\gamma}_2$. Во-первых, после скачкообразного увеличения $\dot{\gamma}$, функция распределения g_n , а, следовательно, и эффективная вязкость η_H , такие же, что и до скачка. Следовательно, сразу же после этого скачка, макроскопическое напряжение σ резко увеличивается. Далее разрушение цепочек с числом кластеров $n > n_c(\dot{\gamma})$ приводит к уменьшению вязкости феррожидкости и поэтому к быстрому уменьшению напряжения σ . Так как гидродинамические разрушающие силы максимальны вблизи цепочки, то можно ожидать разрушение длинных цепочек посередине. Однако число кластеров во вторичных цепочках, скорее всего, меньше, чем число кластеров $n_c(\dot{\gamma}_2)$ в цепочках, находящихся в равновесном состоянии. Поэтому, вторичные цепочки растут до тех пор, пока число кластеров не достигнет $n_c(\dot{\gamma}_2)$. Это вызывает увеличение эффективной вязкости и, поэтому, увеличение напряжения σ после определенной минимальной величины. Очевидно, чем больше скачок скорости сдвига $\dot{\gamma}$, тем более большое число цепочек должно быть разрушено.

Исследования, проведенные на отчетном этапе, показали, что реологические свойства магнитных суспензий очень чувствительны к фракционному составу частиц, из которых состоят эти системы. Так, в традиционных полидисперсных феррожидкостях, присутствие относительно мелких частиц, не способных объединяться в цепочечные и иные гетероагрегаты, существенно влияет на размеры этих агрегатов, образованных наиболее крупными частицами, и поэтому влияет на макроскопические свойства феррожидкости. Самые мелкие частицы, с диаметром несколько нанометров, за счет стерических эффектов увеличивают характерную длину цепочек и, как следствие – магнитовязкий эффект и время вязкоупругой релаксации. Присутствие частиц с диаметром около 10 нм приводит к обратному эффекту. Поэтому реология феррожидкостей чувствительна не только к присутствию наиболее крупных частиц, но и к фракционному составу мелких.

Объединение однодоменных ферромагнитных частиц в кластерные агрегаты, за счет их скрепления полимерной шубой, приводит к существенному увеличению реологических свойств системы и времени ее вязкоупругого отклика. В то же время, композиционные феррожидкости седиментационно устойчивы. Это открывает новые возможности практического использования магнитных жидкостей в современных высокотехнологических приложениях.

3. Сравнение теоретических предсказаний магнитных свойств сильно концентрированных магнитных нанодисперсных жидкостей с экспериментальными данными и данными компьютерного моделирования

Магнитные жидкости (феррожидкости, ферроколлоиды) представляют собой устойчивые взвеси ферро- и ферромагнитных наночастиц в жидких носителях. Наиболее выгодной энергетической позицией пары магнитных наночастиц является димер с ориентацией их магнитных моментов типа "голова-хвост". Это является основанием для широко распространенной трактовки феррожидкостей как структурированной коллоидной взвеси, содержащей агрегаты в форме гибких цепочек, колец или разветвленной сетки частиц. Естественно, что такие микроструктурные образования могут существовать в ферроколлоидах только с достаточно крупными частицами, интенсивно взаимодействующими друг с другом посредством магнитных диполь-дипольных сил. В качестве меры такой интенсивности традиционно используется параметр диполь-дипольного взаимодействия $\lambda = m^2/d^3 kT$, имеющий смысл отношения характерной энергии взаимодействия магнитных моментов двух частиц при их контакте m^2/d^3 (m – магнитный момент, d – диаметр частиц) к тепловой энергии kT . При $\lambda > 4$ наличие таких агрегатов подтверждено данными компьютерного моделирования [65-69], известны также косвенные признаки их присутствия в экспериментах [70-73]. Так, результаты экспериментов в скрещенных полях, анализа спектра динамической восприимчивости, оптических измерений, отражающих эффект двулучепреломления и магнито-вязкий эффект подразумевают возможность формирования в феррожидкостях гибких цепей феррочастиц. Однако, точные параметры систем, при которых образование цепочек является наиболее вероятным, не известны. На 1 этапе настоящего проекта были представлены данные по оценке влияния среднего диаметра частиц на возможность формирования цепочек в монодисперсной феррожидкости, определены параметры цепочечных агрегатов в зависимости от температуры и напряженности внешнего магнитного поля. Кроме того, был проведен подробный анализ экспериментов с магнетитовыми феррожидкостями, который позволил получить дополнительные сведения об условиях формирования устойчивых цепочек в них.

Прямое экспериментальное изучение микроструктуры феррожидкостей возможно только с помощью техники малоуглового нейтронного рассеивания [74-77], позволяющего определить структурный фактор. Последний демонстрирует особенности межчастичных корреляций в Фурье-пространстве. Анизотропия этих корреляций в феррожидкостях, содержащих цепочечные агрегаты, и вызванные этим аномалии структурного фактора достаточно полно изучены экспериментально [73, 74, 77], методами компьютерного

моделирования [66, 68, 78]. Полное теоретическое исследование структурного фактора рассеяния феррожидкостей с цепочечными агрегатами проведено на 2 этапе настоящего проекта. В ходе работы по данному этапу был развит статистико-механический подход для построения парной корреляционной функции (или радиальной функции распределения) и структурного фактора магнитных нанодисперсных коллоидов, содержащих цепочечные агрегаты. Для этого использовался метод минимизации функционала плотности свободной энергии системы, алгоритм построения радиальной функции распределения, а затем вычислялся структурный фактор как ее Фурье-образ.

Однако для широко используемых магнитных жидкостей типа "магнетит в керосине", стабилизированных олеиновой кислотой, среднее значение параметра магнито-дипольного взаимодействия λ имеет порядок единицы. Устойчивые цепочечные агрегаты в таких феррожидкостях фактически невозможны, поэтому анизотропия свойств таких систем не может быть объяснена в рамках "цепочечной" трактовки. Тем не менее, даже в таких системах с невысокой интенсивностью магнито-дипольных взаимодействий ($\lambda < 2$) роль межчастичных корреляций весьма высока. Теоретические модели, использующие различные методы статистической механики: средне-сферическое приближение [79-82], приближение среднего поля [83, 84], термодинамическая теория возмущений [85, 86], доказали, что магнитостатические свойства феррожидкостей существенно отличаются от закона намагничивания идеального парамагнитного газа Ланжевена. Экспериментальные измерения [83, 87, 88] подтвердили эти выводы. Влияние межчастичных корреляций может быть также оценено прямым образом при изучении структурного фактора рассеивания. Однако обработка экспериментальных данных, полученных в Фурье-пространстве волновых векторов рассеивания, требует вычисления парной корреляционной функции системы феррочастиц, в том числе в магнитном поле. Анализ межчастичных корреляций в концентрированных феррожидкостях с невысокой интенсивностью магнито-дипольных взаимодействий ($\lambda < 2$), анизотропии парной корреляционной функции в магнитном поле и вызванной этим анизотропии структурного фактора рассеивания посвящены 3 и 4 этапы настоящего проекта. На 3 этапе было проведено вычисление парной корреляционной функции концентрированной магнитной жидкости методом диаграммного (вириального) разложения. Для учета многочастичных корреляций были рассчитаны многочастичные диаграммы. На основе проведенных исследований был построен и проанализирован структурный фактор концентрированной магнитной жидкости. На 4 этапе настоящего проекта было изучено поведение парной корреляционной функции концентрированной магнитной жидкости в магнитном поле и впервые теоретически обоснована анизотропия

структурного фактора концентрированной магнитной жидкости со слабыми межчастичными диполь-дипольными взаимодействиями во внешнем магнитном поле.

Нецентральное диполь-дипольное взаимодействие магнитных моментов частиц ведет к существенной модификации термодинамических свойств феррожидкостей по сравнению с таковыми для аналогичных дисперсий только с центральным взаимодействием. Наиболее существенно это отличие проявляется в концентрированных системах. Свойства низкоконтрированных магнитных жидкостей подробно описаны в работе [89], где феррожидкость моделировалась идеальным парамагнитным газом частиц. Однако результаты экспериментов, проведенных с концентрированными магнитными жидкостями показывают существенное отклонение от теоретических предсказаний [87]. Модели использующие различные методы статистической физики доказали, что свойства магнитной жидкости отличаются от свойств идеального парамагнитного газа. Причина этого – межчастичные корреляции, которые играют решающую роль в концентрированных магнитных жидкостях. Очень много теоретических работ посвящено исследованию различных свойств магнитных жидкостей: магнитных [85], термодинамических [90], диффузионных [91], однако область применимости этих результатов ограничивается слабо и умеренно концентрированными магнитными жидкостями. На 4 этапе настоящего проекта были теоретически исследованы свойства концентрированных магнитных жидкостей. Основываясь на статистико-механическом расчете свободной энергии концентрированной магнитной жидкости методом диаграммного (вириального) разложения, проведенном на 3 этапе проекта, были исследованы термодинамические свойства стерически и ионно стабилизированных магнитных жидкостей, такие как осмотическое давление, теплоемкость, изотрмическая сжимаемость, таплоемкость при постоянном объеме. Изучена анизотропия диффузионных процессов в магнитных жидкостях в магнитном поле.

Типичные магнитные жидкости, синтезируемые на сегодняшний день, содержат обычно до 20% по объему магнитной фазы, имеют намагниченность насыщения 70-90 кА/м и начальную восприимчивость в несколько единиц. Физические свойства таких магнитных жидкостей могут быть удовлетворительно описаны в рамках той или иной теоретической модели, учитывающей межчастичные взаимодействия: среднесферическое приближение [91], приближение среднего поля [84], термодинамическая теория возмущений [85, 92].

Ситуация значительно меняется при переходе к высококонцентрированным феррожидкостям с начальной магнитной восприимчивостью в несколько десятков единиц. В таких системах эффекты диполь-дипольных межчастичных взаимодействий играют доминирующую роль. В этом случае ни одна из известных теоретических моделей не способна адекватно описать аномально высокий магнитный отклик лабораторных образцов

предельно концентрированных феррожидкостей, начальная восприимчивость которых достигает 100 при комнатных температурах [87].

На 5 этапе настоящего проекта была разработана статистико-механическая модель, которая позволила адекватно описать магнитные статические свойства высококонцентрированной магнитной жидкости с высокими показателями начальной магнитной восприимчивости. В результате проведенной работы была получена формула для начальной магнитной восприимчивости высококонцентрированных магнитных жидкостей. Для проверки адекватности построенной теории на 6, заключительном этапе будет проведено сравнение теоретических результатов с данными компьютерного моделирования и физическими экспериментами.

При проведении исследований на 5 этапе настоящего проекта была получена формула для начальной магнитной восприимчивости, учитывающая многочастичные корреляции в системе:

$$\chi = \chi_L \left(1 + \frac{\chi_L}{3} + \frac{\chi_L}{75} \lambda^2 + \frac{4\chi_L}{3675} \lambda^4 + \frac{\chi_L^2}{144} + \left(\frac{\ln 2}{120} - \frac{1187}{72000} \right) \chi_L^2 \lambda \right), \quad (73)$$

где $\lambda = \frac{m^2}{kTd^3}$ – параметр диполь-дипольного взаимодействия, $\chi_L = \frac{m^2 n}{kT}$ – восприимчивость Ланжевена, m – магнитный момент частицы, d – диаметр частицы, kT – тепловая энергия системы, n – числовая концентрация феррочастиц.

На рис. 19 показаны графики зависимости начальной магнитной восприимчивости (73) от интенсивности межчастичного диполь-дипольного взаимодействия для различных значений объемной концентрации феррочастиц: 0.2, 0.3, 0.4, и 0.5.

Из рисунка видно, что рост интенсивности диполь-дипольного взаимодействия ведет к увеличению начальной магнитной восприимчивости феррожидкости. Аналогичная картина наблюдается в зависимости начальной магнитной восприимчивости от объемной концентрации феррочастиц (рис. 20). Увеличение параметра диполь-дипольного взаимодействия приводит к увеличению значений концентрационной зависимости начальной магнитной восприимчивости.

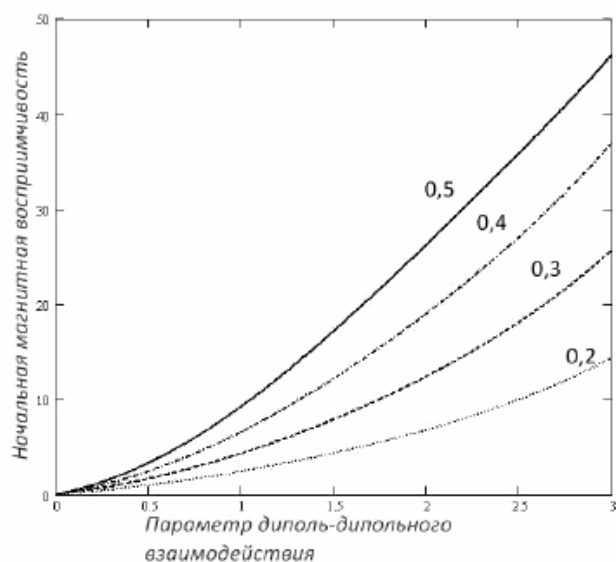


Рисунок 19 — Зависимость начальной магнитной восприимчивости от параметра диполь-дипольного взаимодействия для различных значений объемной концентрации феррочастиц: 0.2, 0.3, 0.4, и 0.5.

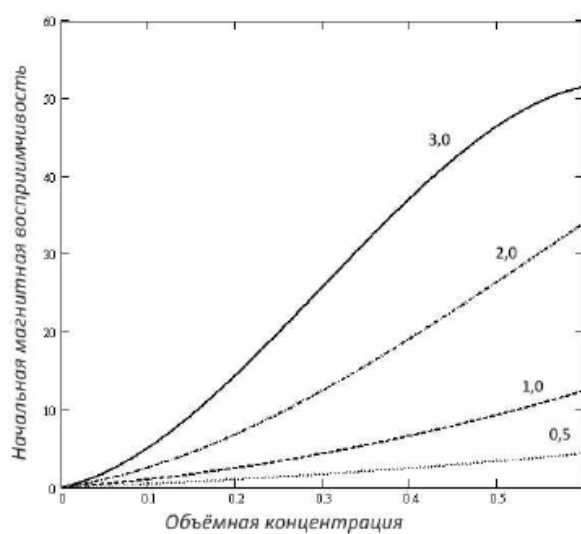


Рисунок 20 — Зависимость начальной магнитной восприимчивости от объемной концентрации феррочастиц для разных значений параметра диполь-дипольного взаимодействия: 0.5, 1.0, 2.0, и 3.0.

Сравнение теоретических результатов (73) с данными компьютерного моделирования, проведенного в Университете г. Эдинбурга (Великобритания) показало достаточно хорошее согласование (рис. 21, 22).

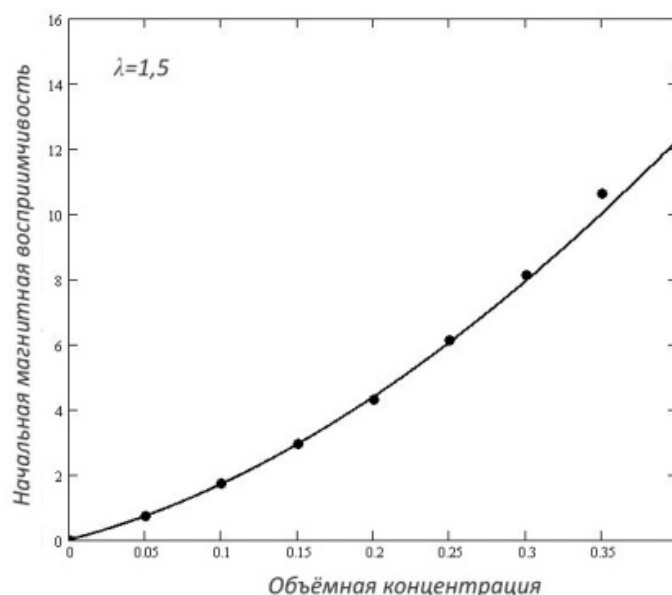


Рисунок 21 — Начальная магнитная восприимчивость в зависимости от объёмной концентрации феррочастиц. Точками обозначены результаты компьютерного эксперимента полученного в Университете г. Эдинбурга, сплошная линия - значение восприимчивости, вычисленное по формуле (73). Параметр диполь-дипольного взаимодействия $\lambda=1.5$.

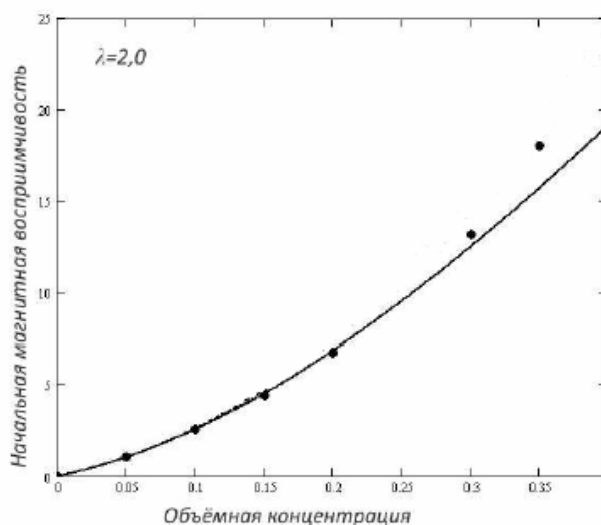


Рисунок 22 — Начальная магнитная восприимчивость в зависимости от объёмной концентрации феррочастиц. Точками обозначены результаты компьютерного эксперимента полученного в Университете г. Эдинбурга, сплошная линия - значение восприимчивости, вычисленное по формуле (73). Параметр диполь-дипольного взаимодействия $\lambda=2$.

При проведении компьютерного эксперимента потенциал межчастичного взаимодействия моделировался, так же как и в теории, суммой диполь-дипольного потенциала и отталкивающим потенциалом твердых сфер.

Таким образом, учет многочастичных корреляций при выводе формулы (73), позволил получить аналитическое выражение для начальной магнитной восприимчивости, которое очень хорошо согласуется с данными компьютерного моделирования даже для достаточно концентрированных магнитных жидкостей (с объемной концентрацией ~ 0.35).

Однако синтезированные в последнее время магнитные жидкости достигают рекордных показателей начальной магнитной восприимчивости [например, 23]: при объемной концентрации 0,58 и комнатных температурах значение начальной магнитной восприимчивости превышает 100. Ни одна из существующих в настоящее время моделей не предсказывала таких высоких значений. Несмотря на хорошее согласование теоретических результатов с данными компьютерного эксперимента, формула (73) также не смогла предсказать высокие, экспериментально полученные значения начальной магнитной восприимчивости (рис. 23).

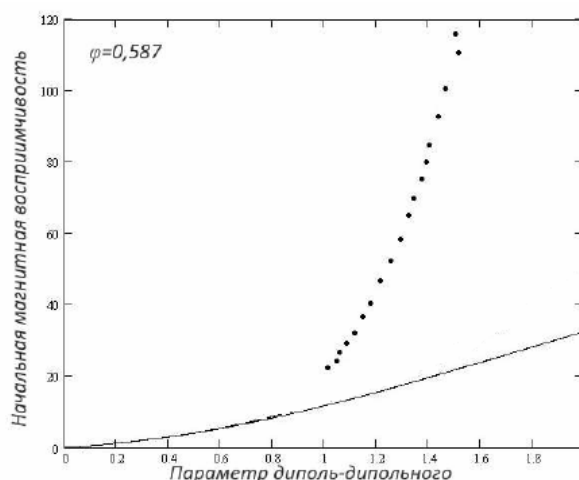


Рисунок 23 — Начальная магнитная восприимчивость в зависимости от параметра диполь-дипольного взаимодействия при объемной концентрации феррочастиц 0.587. Точками обозначены результаты физического эксперимента [87], сплошная линия – формула (73).

Несоответствие теоретических результатов и физического эксперимента возможно связано не с недостаточной точностью формулы (73), а с моделью, которая использовалась при получении теоретических результатов и данных компьютерного эксперимента. Для того, чтобы проверить это предположение, потенциал межчастичного взаимодействия,

используемый ранее (сумма потенциалов диполь-дипольного и твердых сфер) был заменен на сумму потенциалов диполь-дипольного $U_d(ij)$ и прямоугольная яма $U_s(ij)$:

$$U_d(ij) = - \left[\frac{3(\mathbf{m}_i \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{m}_j \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} - \frac{(\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j)}{r_{ij}^3} \right],$$

$$U_s = \begin{cases} \infty, & 0 \leq r_{ij} \leq d \\ -U_0, & d < r_{ij} < r_0 \\ 0, & r_0 \leq r_{ij} \end{cases},$$

где r_{ij} — расстояние между частицами i и j , r_0 и U_0 — параметры потенциальной ямы: ширина и глубина, соответственно. В дальнейшем считаем, что $2d \leq r_0 \leq 3d$

На рисунке 6 представлено графическое изображение потенциала прямоугольная яма:

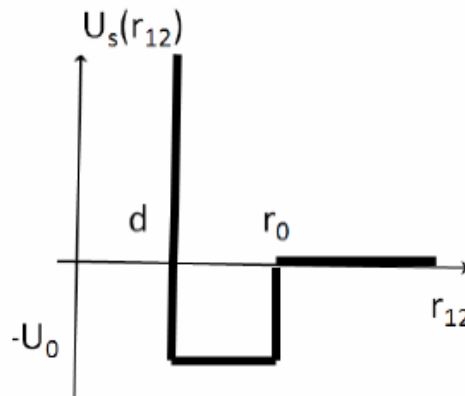


Рисунок 24 — Графическое представление межчастичного потенциала «прямоугольная яма».

Определение начальной магнитной восприимчивости проводилось с помощью метода диаграмм, аналогично вычислениям, представленным на 5 этапе настоящего проекта.

Диаграммный метод заключается в том, что каждому слагаемому в формуле (73) сопоставляется некоторая комбинация скелетных диаграмм. Основные принципы построения диаграмм следующие:

Количество вершин в диаграмме совпадает с числом частиц, корреляции между которыми учитываются.

Линии между частицами соответствуют межчастичным взаимодействиям. Типы линий (сплошная, двойная сплошная, пунктир) описывает тип межчастичного взаимодействия.

Диаграммы, определяющие коэффициенты формулы (73) показаны на рис 25.

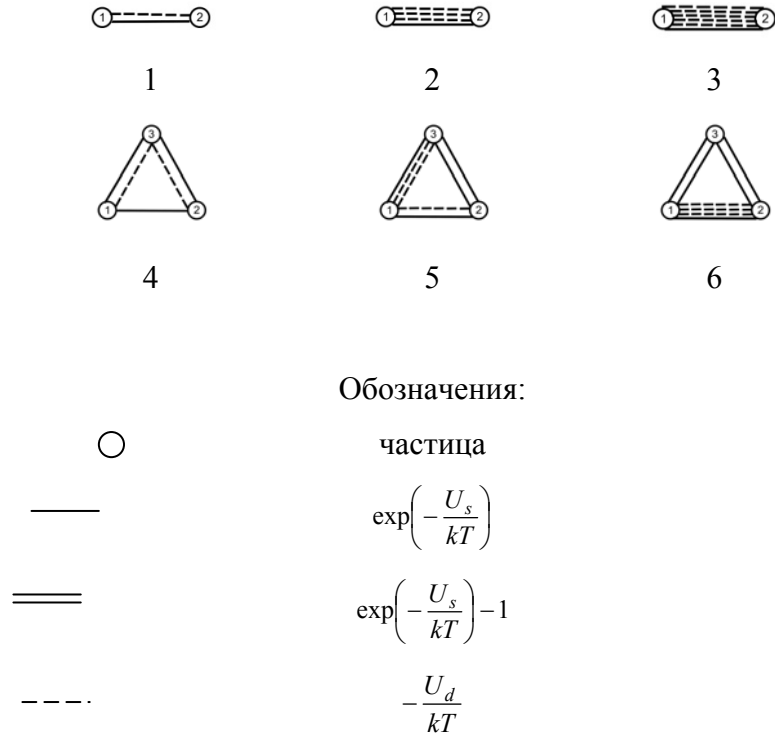


Рисунок 25 — Диаграммы, соответствующие формуле (73).

Для вычисления значения, соответствующего каждой из диаграмм, необходимо произвести усреднение функций, изображённых на диаграмме по ориентациям магнитных моментов частиц и по всем возможным расположениям частиц в объёме:

$$a \int F(12)F(23)F(31) \cos \omega_1 \cos \omega_2 d\mathbf{m}_i d\mathbf{r}_i \quad i=1,2,3$$

где функция $F(ij)$ определяется типом линии на диаграмме, соединяющей i и j частицы; $\omega_1 \omega_2$ – углы между направлением магнитного момента частиц 1, 2 и осью Oz; коэффициент a определяется типом диаграммы.

Итогом усреднения будет аналитическое выражение для начальной магнитной восприимчивости, которое зависит от размеров потенциальной ямы:

$$\chi = \chi_L \left(1 + \chi_L w_1(r, u) + \chi_L \lambda^2 w_2(r, u) + \chi_L \lambda^4 w_3(r, u) + \chi_L^2 w_4(r, u) + \chi_L^2 \lambda w_5(r, u) \right), \quad (74)$$

где

$$w_1(r, u) = \frac{1}{3},$$

$$w_2(r, u) = \frac{1}{75} \frac{-u + ur^6 + 1}{r^6},$$

$$u = \exp\left(-\frac{U_0}{kT}\right)$$

$$w_3(r, u) = -\frac{1}{144} \frac{36ur^2 - 2u + u^2 + 15u^2r^6 - 18u^2r^2 - 32u^2r^3 + 32r^3 + 1 - 16r^6 - 18r^2}{r^6}$$

$$w_4(r, u) = v_1(r, u) + v_2(r, u)$$

$$\begin{aligned} v_1(r, u) = & \frac{1}{168000}(u-1)^2 \frac{2240r^{16} - 2016r^{15} - 11200r^{14} + 6377r^{13}}{(r-1)^5(r+1)^5r^3} + \\ & + \frac{1}{168000}(u-1)^2 \frac{22400r^{12} - 1645r^{11} - 22407r^{10}}{(r-1)^5(r+1)^5r^3} + \\ & + \frac{1}{168000}(u-1)^2 \frac{-16870r^9 + 11235r^8 + 31430r^7 - 2310r^6}{(r-1)^5(r+1)^5r^3} + \\ & + \frac{1}{168000}(u-1)^2 \frac{-14707r^5 + 70^4 + 3575r^3 - 35r^2 + 7}{(r-1)^5(r+1)^5r^3} + \\ & + \frac{1}{84000}(1-u) \frac{-19670r^4 - 8715r^8 - 17430r^6 - 1679 + 1743r^{10} + 7819r^2}{(r-1)^5(r+1)^5} + \frac{71}{24000} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} v_2(r, u) = & \frac{1}{360}u \frac{3r^6 \ln 2 - 7r^6 + 16}{r^6} + \\ & + u(u-1) \left(\frac{\ln(r-1)}{120} - \frac{\ln r}{120} + \frac{\ln 2}{120} \right) + \\ & + u(u-1) \frac{1}{1440} \frac{73r^4 - 124r + 89r^2 - 28r^8 + 68r^7 + 62 + 4r^5 - 46r^6 - 86r^3}{r^6(r-1)^2} + \\ & + \frac{-2}{45r^6} + (u-1) \left(\frac{\ln r}{120} - \frac{\ln(r+1)}{120} \right) + \\ & + (u-1) \frac{1}{1440} \frac{-89r^2 - 124r + 68r^5 + 18r^6 + 12r^7 - 22r^3 + 55r^4 - 62}{r^6(r+1)^2} \end{aligned}$$

$$w_5(r, u) = \frac{4}{3675} \frac{-u + ur^{12} + 1}{r^{12}}$$

Для объемной концентрации 0.4 и значений параметров $r_0 = 2.9$ и $U_0 = -kT \ln 3$ определенная описанным выше способом начальная магнитная восприимчивость (2) представлена на рис. 8 в сравнении с формулой (73).

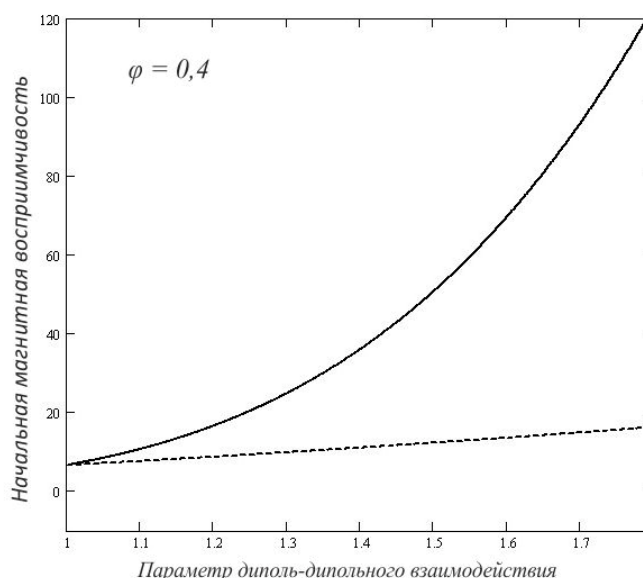


Рисунок 26 — График начальной магнитной восприимчивости в зависимости от параметра диполь-дипольного взаимодействия, объемная концентрация феррочастиц 0.4. Сплошная линия - значение начальной магнитной восприимчивости (74), пунктир – формула (73).

Таким образом, изменение межчастичного потенциала взаимодействия позволило теоретически предсказать экстремально высокие значения начальной магнитной восприимчивости, полученные в физических экспериментах. Следовательно, в концентрированных магнитных жидкостях с высокими магнитными показателями основной вклад в магнитную восприимчивость вносят стерические межчастичные взаимодействия, учет которых был сделан с помощью потенциала «прямоугольная яма».

На рисунке 27 приведено сравнение теоретически определенной начальной магнитной восприимчивости (74) с экспериментальными данными [87].

Из рисунка видно, что теоретически определенное значение начальной магнитной восприимчивости (74) качественно смогло предсказать результаты физического эксперимента, количественное согласие данных - удовлетворительное.

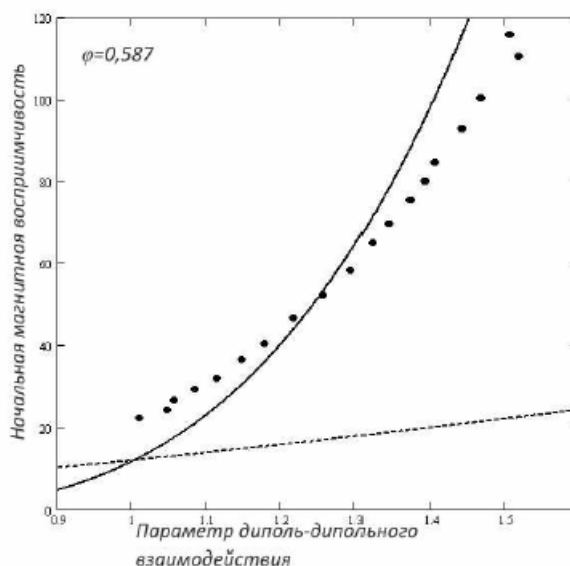


Рисунок 27 — График начальной магнитной восприимчивости от параметра диполь-дипольного взаимодействия, объемная концентрация феррочастиц 0.587. Точками обозначены результаты физического эксперимента, сплошная линия – формула (74), пунктир – формула (73).

В итоге, получено аналитическое выражение начальной магнитной восприимчивости (73) феррожидкости, которое очень хорошо согласуется с результатами компьютерного моделирования. Для описания свойств лабораторных образцов магнитных жидкостей с экстремально высокими магнитными характеристиками была построена модель феррожидкости, межчастичное взаимодействие в которой учитывалось в виде суммы потенциалов диполь-дипольного и «прямоугольная яма». Определенное выражение для начальной магнитной восприимчивости (74) адекватно описало результаты физических экспериментов. Таким образом, впервые, теоретическая модель предсказала высокие показатели начальной магнитной восприимчивости ~ 100 , полученные в физических экспериментах.

4. Исследование возможных типов стохастических бифуркаций и разработка конструктивных методов их анализа для изучаемых систем

Функционирование большинства реальных систем сопровождается воздействием неконтролируемых случайных возмущений. Присутствие даже малых случайных возмущений может привести к существенным изменениям в динамике системы [94]. Известен широкий круг явлений, связанных с воздействием случайных помех: стохастический резонанс, индуцированные шумами переходы, порождаемый шумами

порядок и хаос. Хорошо известно, что фазовый портрет нелинейной системы может быть существенно изменен под воздействием шума. Эффекты, связанные с присутствием шума, значительно усиливаются вблизи точек бифуркации. Благодаря высокой чувствительности аттракторов в зонах бифуркаций даже весьма малые шумы могут порождать качественные изменения динамики.

В конце 70х годов 20 века большое развитие получила теория стохастических бифуркаций, изучающая качественное изменение поведения динамических систем под воздействием случайных возмущений. В работах [94-97] выделяются два основных подхода к определению понятия стохастической бифуркаций: феноменологический подход (Р-бифуркация), описывающий качественное изменение стационарной плотности распределения, и динамический (D-бифуркация), описывающий изменение знака старшего показателя Ляпунова. Дальнейшее изучение стохастических бифуркаций в рамках, индуцированных шумом переходов для одномерного случая, проведено в работах [98, 99]. Воздействие шума на бифуркацию Хопфа двумерных систем подробно рассмотрено в работах [100-104]. Для хаотических систем возможные стохастические бифуркации еще только начинают рассматриваться [105].

Полученные результаты, описывающие явления стохастических бифуркаций, представлены в обзорах [106-109].

В данном отчете представлены результаты исследований по возможным типам стохастических бифуркаций для одномерных и двумерных систем, основанные на конструктивном описании вероятностных свойств соответствующих стохастических аттракторов и их качественных изменений. Базовой математической моделью разработанных методов анализа является функция плотности распределения. Особенности формы этой функции, расположение максимумов и минимумов, их сдвигов и качественных преобразований являются объектом детального изучения.

Под действием случайных возмущений, в системе формируется устойчивое стационарное вероятностное распределение – стохастический аттрактор. Изменение параметров случайных возмущений сопровождается изменением вероятностных свойств этого аттрактора.

В работе изучается два типа изменения. Первый тип связан с количественными изменениями – сдвигами и сглаживанием пиков плотности распределения. Второй тип связан с качественными преобразованиями - изменениями самой структуры аттрактора, при которых меняется количество экстремумов.

В п.1 на примере одномерной динамической системы детально исследуются количественные изменения плотности распределения. Центральным вопросом здесь является оценка сдвига пика плотности распределения при изменении параметров шума.

В п.2 на примере одномерных и двумерных динамических систем исследуются качественные изменения плотности распределения, связанные с индуцированными шумами переходами между аттракторами типа: равновесие – равновесие, цикл – цикл+равновесие – равновесие.

В п.3 представлены методы анализа обратных стохастических бифуркаций, основанные на использовании техники функции стохастической чувствительности, разработанной на предыдущих этапах данного проекта.

1. Индуцированные шумом сдвиги аттракторов

Рассмотрим детерминированное одномерное нелинейное дифференциальное уравнение:

$$dx = f(x)dt \quad (75)$$

Здесь $f(x)$ – достаточно гладкая функция. В одномерном случае аттракторами системы являются лишь устойчивые точки покоя $x(t) \equiv \bar{x} (f(\bar{x}) = 0)$.

Рассмотрим уравнение Ито, соответствующее уравнению (75)

$$dx = f(x)dt + \varepsilon\sigma(x)dw, \quad (76)$$

где w – винеровский процесс, $\sigma(x)$ – функция, задающая зависимость случайных возмущений от состояния системы, ε – параметр интенсивности возмущений. Стационарное уравнения Фоккера-Планка-Колмогорова для (76) имеет вид

$$\frac{\varepsilon^2}{2}(\sigma^2(x)\rho(x))'' - (f(x)\rho(x))' = 0.$$

Решение этого уравнения записывается в виде

$$\rho(x) = \frac{K}{\sigma^2(x)} \exp\left(\frac{2}{\varepsilon^2} \int_{x_0}^x \frac{f(s)}{\sigma^2(s)} ds\right)$$

где $K > 0$ – константа интегрирования, которая может быть найдена из условия нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = 1.$$

Функция $\rho(x)$ задает стационарную функцию плотности распределения, если интеграл $\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx$ сходится. Функция распределения является основной характеристикой самых разнообразных систем, которым свойственно случайное поведение и содержит в себе всю возможную и потому исчерпывающую информацию о свойствах таких систем. В работе [107] доказана устойчивость стационарной плотности.

Обозначим через \tilde{x} точки, отвечающие локальным максимумам плотности вероятности $\rho(x)$: $\tilde{x} = \operatorname{argmax} \rho(x)$. Значения \tilde{x} играют важную роль в описании стохастического равновесия: величины \tilde{x} отмечают точки в которых концентрация случайных состояний системы максимальна. Исследуем взаимное расположение \tilde{x} и \bar{x} в зависимости от шума.

Рассмотрим сначала случай аддитивного шума $\sigma(x) = \operatorname{Const} = \sigma$. Тогда функцию плотности распределения можно записать в виде

$$\rho(x) = \frac{K}{\sigma^2} \exp \left(\frac{2}{\sigma^2 \varepsilon^2} \int_{x_0}^x f(s) ds \right).$$

Для того, чтобы выяснить в каких точках вероятность появления случайных состояний системы наибольшая, найдем экстремумы функции $\rho(x)$. Производная функции плотности распределения обращается в ноль в точках, для которых $f(x) = 0$, т.е. в точках равновесия детерминированной системы. Таким образом, в присутствии лишь аддитивного шума точки с максимальной и минимальной концентрацией совпадают с точками покоя детерминированной системы.

Максимумы функции $\rho(x)$ находятся в устойчивых точках покоя \bar{x}_i , с условием $f'(\bar{x}_i) < 0$. Минимумы $\rho(x)$ – в неустойчивых точках \bar{x}_j , $f'(\bar{x}_j) > 0$.

В детерминированной системе неустойчивые точки покоя отделяют один инвариантный интервал от другого. Каждый такой инвариантный интервал содержит единственное устойчивое равновесие и составляет его бассейн притяжения. В детерминированной системе решение не может перейти из одного интервала в другой. В

стохастической системе под действием невырожденных случайных возмущений решения могут переходить из одного интервала в другой.

Пример. Рассмотрим систему (75), функция $f(x)$ которой имеет график, представленный на рис. 28а).

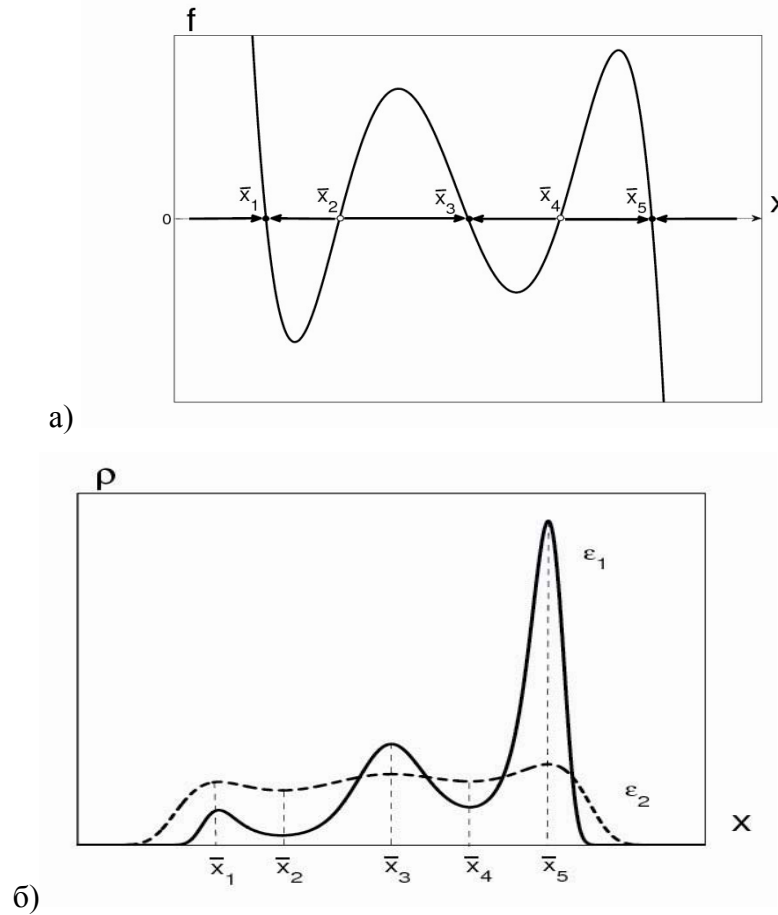


Рисунок 28 — График функции $y = f(x)$ и функция плотности распределения для двух значений интенсивности аддитивного шума $\varepsilon_1, \varepsilon_2$.

Здесь $\bar{x}_1, \bar{x}_3, \bar{x}_5$ — устойчивые равновесия, \bar{x}_2, \bar{x}_4 — неустойчивые равновесия. Бассейном притяжения равновесия \bar{x}_1 является интервал $(-\infty, \bar{x}_2)$, для равновесия \bar{x}_3 — интервал (\bar{x}_2, \bar{x}_4) , и для \bar{x}_5 — интервал (\bar{x}_4, ∞) . На рис. 28б) представлен график стационарной плотности распределения системы (76) для двух значений $\varepsilon_1 < \varepsilon_2$ интенсивности аддитивного шума.

При малом шуме наблюдаются высокие узкие пики функции $\rho(x)$ над устойчивыми равновесиями $\bar{x}_1, \bar{x}_3, \bar{x}_5$. При увеличении интенсивности аддитивного шума эти пики сглаживаются, но по-прежнему имеют максимумы в устойчивых точках покоя.

Рассмотрим теперь случай мультипликативного шума $\sigma(x) \neq \text{Const}$. Тогда производная стационарной плотности обращается в ноль в точках, для которых

$$f(x) = \varepsilon^2 \sigma(x) \sigma'(x). \quad (77)$$

Таким образом, при мультипликативных шумах точка максимальной концентрации \tilde{x} не совпадает с равновесием \bar{x} детерминированной системы и существенно зависит от ε : $\tilde{x} = \tilde{x}(\varepsilon)$.

Исследуем, как величина сдвига $\delta(\varepsilon) = \tilde{x}(\varepsilon) - \bar{x}$ зависит от параметров системы.

Лемма. Пусть \bar{x} – устойчивое равновесие ($f'(\bar{x}) < 0$). Для функции $\delta(\varepsilon)$ при малых значениях ε и достаточно гладких $f(x)$ и $\sigma(x)$, справедливо разложение

$$\begin{aligned} \delta(\varepsilon) = \tilde{x}(\varepsilon) - \bar{x} = & \frac{\sigma(\bar{x})\sigma'(\bar{x})}{f'(\bar{x})} \varepsilon^2 + \\ & + \frac{2f'(\bar{x})((\sigma'(\bar{x}))^2 + \sigma''(\bar{x})\sigma(\bar{x}))\sigma'(\bar{x})\sigma(\bar{x}) - f''(\bar{x})(\sigma'(\bar{x}))^2\sigma^2(\bar{x})}{2(f'(\bar{x}))^3} \varepsilon^4 + O(\varepsilon^6). \end{aligned} \quad (78)$$

Первое приближение сдвига $\delta(\varepsilon) = \frac{\sigma(\bar{x})\sigma'(\bar{x})}{f'(\bar{x})} \varepsilon^2$ определяется величиной интенсивности шума ε и значениями $\sigma(\bar{x})$, $\sigma'(\bar{x})$ и $f'(\bar{x})$. Величина $f'(\bar{x}) < 0$ является характеристическим показателем детерминированной системы в инвариантной окрестности, охватывающей равновесие \bar{x} , и характеризует степень устойчивости. Если производная $f'(\bar{x})$ близка к нулю, то равновесие \bar{x} слабо устойчиво и сдвиг $\delta(\varepsilon)$ достаточно велик. Увеличение степени устойчивости детерминированного равновесия ведет к уменьшению $\delta(\varepsilon)$.

Рассмотрим некоторые примеры одномерных систем при в присутствии аддитивных и параметрических шумов.

1.1 Линейная стохастическая система

Рассмотрим линейную систему

$$dx = \mu x dt \quad (79)$$

У этой детерминированной системы при $\mu \neq 0$ существует единственная точка покоя $\bar{x} = 0$. При значении параметра $\mu < 0$ точка покоя устойчива, при $\mu > 0$ неустойчива. На рис. 2 представлена бифуркационная диаграмма.

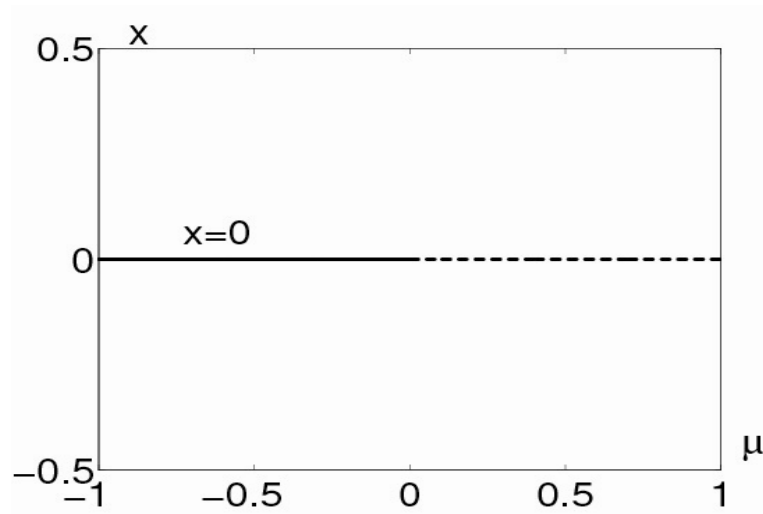


Рисунок 29 — Бифуркационная диаграмма линейной системы. Устойчивое равновесие указано сплошной линией, неустойчивое — пунктирной.

Рассмотрим стохастически возмущенную систему (79) в интерпретации Стратоновича

$$dx = \mu x dt + \sigma_1 (x - a) \circ dw_1 + \sigma_2 \circ dw_2, \quad (80)$$

где w_1, w_2 — независимые стандартные винеровские процессы, $\sigma_1 > 0$ — интенсивность мультипликативного шума, $\sigma_2 > 0$ — интенсивность аддитивного шума, $a \in R$.

Рассмотрим случай, когда на систему действует только аддитивный шум ($\sigma_1 = 0$). Тогда решение уравнения Фоккера-Планка-Колмогорова примет вид

$$\rho(x) = K e^{\frac{\mu}{\sigma_2^2} x^2},$$

с константой интегрирования $K > 0$. Это решение при значении параметра $\mu < 0$ задает гауссовскую стационарную плотность распределения со средним значением $m=0$ и дисперсией $D = -\frac{\sigma_2^2}{2\mu}$. Как видим, в случае, когда на систему (6) действует лишь аддитивный шум, стохастический аттрактор существует только при $\mu < 0$ и имеет гауссовское распределение.

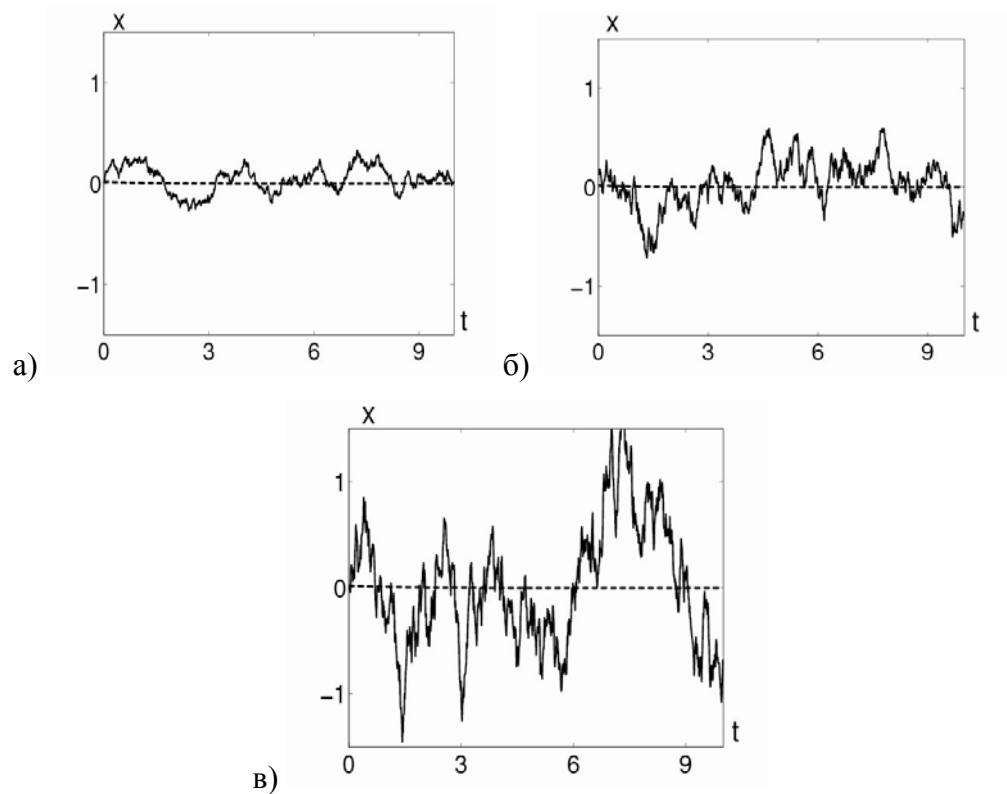


Рисунок 30 — Случайные траектории системы (6) для $\mu = -1$, $\sigma_1 = 0$ при значениях аддитивного шума а) $\sigma_2 = 0.2$, б) $\sigma_2 = 0.5$, в) $\sigma_2 = 1$.

На рис. 30 представлены случайные траектории системы для $\mu = -1$, $\sigma_1 = 0$ при трех значениях интенсивности аддитивного шума $\sigma_2 = 0.2$, $\sigma_2 = 0.5$ и $\sigma_2 = 1$. Пунктиром указано детерминированное решение. Проведем анализ функции плотности распределения $\rho(x)$ в зависимости от параметров μ и σ_2 . Единственным экстремумом функции $\rho(x)$ является точка $\tilde{x} = 0$. В этом случае аттрактором линейной системы (80) является стохастическая точка покоя. Изменение интенсивности σ_2 аддитивного шума не меняет положение локального экстремума функции плотности распределения. Увеличение аддитивного шума приводит к увеличению разброса случайных траекторий. На рис. 31

представлены графики функций плотности распределения $\rho(x)$ для значения параметра для $\mu = -1$, $\sigma_1 = 0$ при значениях аддитивного шума $\sigma_2 = 0.2$, $\sigma_2 = 0.5$ и $\sigma_2 = 1$.

Будем рассматривать случай ненулевого мультипликативного шума ($\sigma_1 \neq 0$). В этом случае решением уравнения Фоккера-Планка-Колмогорова является функция

$$\rho(x) = K(\sigma_1^2(x-a)^2 + \sigma_2^2)^{\left(\frac{\mu-1}{\sigma_1^2-2}\right)} \exp\left(\frac{2\mu a}{\sigma_1\sigma_2} \operatorname{arctg} \frac{\sigma_1}{\sigma_2}(x-a)\right),$$

где $K > 0$ – константа интегрирования. Стохастический аттрактор у этой системы существует лишь при $\mu < 0$. Точка максимальной концентрации случайных траекторий, являющаяся экстремумом функции $\rho(x)$, связана с параметрами системы соотношением

$\tilde{x} = \frac{\sigma_1^2 a}{\sigma_1^2 - 2\mu}$. Зависимость \tilde{x} от μ , при фиксированных σ_1, σ_2 представлена на рис. 32.

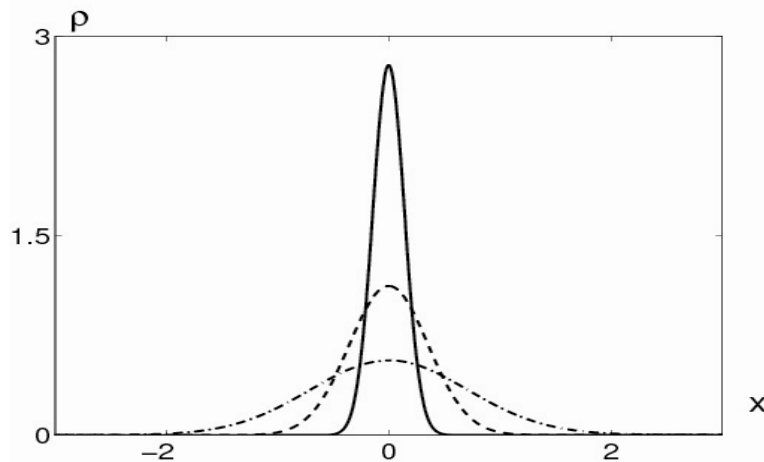


Рисунок 31 — Функция плотности распределения $\rho(x)$ системы (6) для $\mu = -1$, $\sigma_1 = 0$ при трех значениях аддитивного шума $\sigma_2 = 0.2$ (сплошная), $\sigma_2 = 0.5$ (пунктир) и $\sigma_2 = 1$ (точка-тире).

На рис. 33 представлены случайные траектории системы для фиксированных параметров $\mu = -1$, $a = 1$, $\sigma_2 = 0.2$ при значениях мультипликативного шума $\sigma_1 = 0.2$, $\sigma_1 = 0.5$ и $\sigma_1 = 1$. Изменение интенсивности σ_1 мультипликативного шума сдвигает точки экстремума функции плотности распределения.

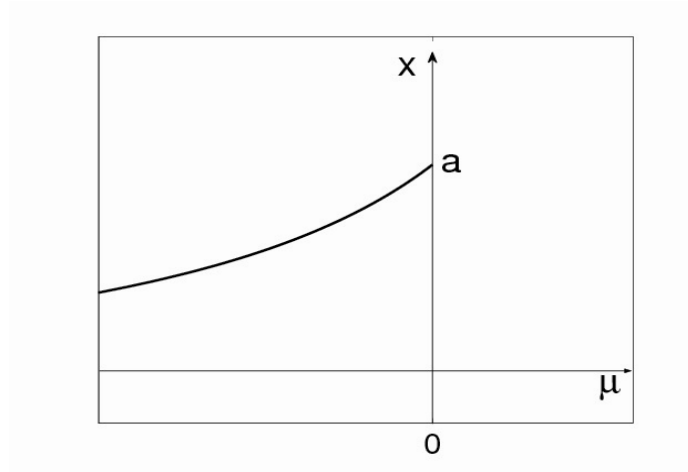


Рисунок 32 — Зависимость положения точки максимальной концентрации $\tilde{x}(\mu)$ от μ .

На рис. 34 представлены графики функции плотности распределения при фиксированном значении параметра $\mu = -1$, $a = 1$, значении аддитивного шума $\sigma_2 = 0.2$ и трех значений параметра мультипликативного шума $\sigma_1 = 0.2$ (сплошная), $\sigma_1 = 0.5$ (пунктир) и $\sigma_1 = 1$ (точки). Пунктиром указано детерминированное решение. Воздействие ненулевого мультипликативного шума приводит к перераспределению случайных траекторий от точки

$$\bar{x} = 0 \text{ к точке } \tilde{x} = \frac{\sigma_1^2 a}{\sigma_1^2 - 2\mu}.$$

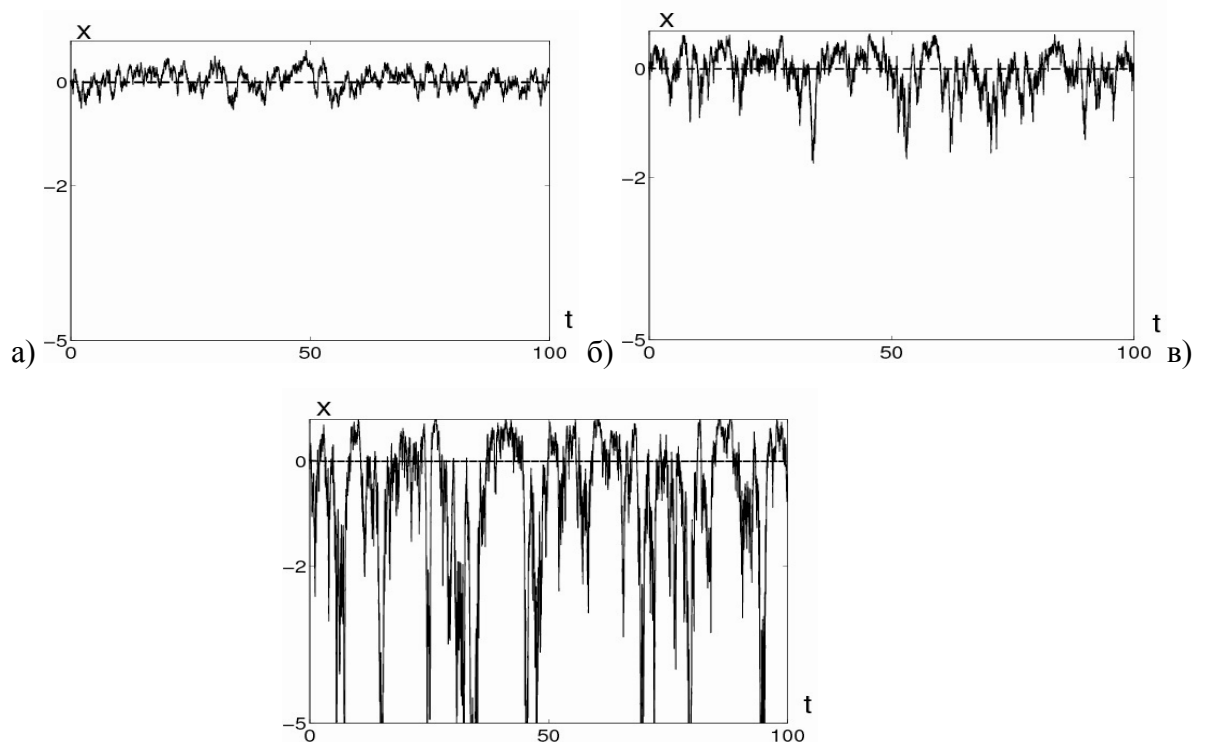


Рисунок 33 — Случайные траектории системы при $\mu = -1$, $a = 1$, $\sigma_2 = 0.2$ для значений мультипликативного шума а) $\sigma_1 = 0.2$, б) $\sigma_1 = 0.5$, в) $\sigma_1 = 1$.

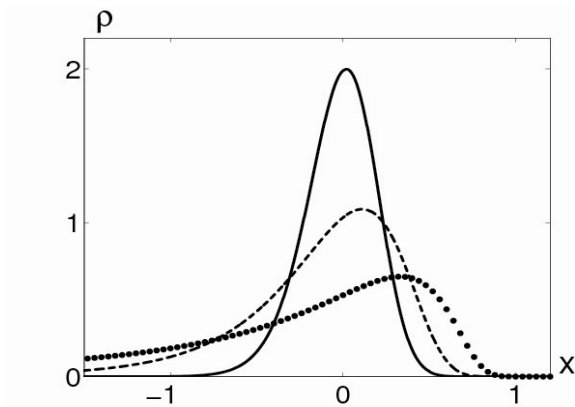


Рисунок 34 — Функция плотности распределения при $\mu = -1$, $a = 1$, $\sigma_2 = 0.2$ для $\sigma_1 = 0.2$ (сплошная), $\sigma_1 = 0.5$ (пунктир), $\sigma_1 = 1$ (точки).

Таким образом, в интерпретации Стратоновича не существует зоны стабилизации неустойчивой точки покоя. При $\mu < 0$ поведение системы (80) качественно не отличается от поведения системы в интерпретации Ито (80). В системе (80) также наблюдается сдвиг стохастических аттракторов при изменении интенсивности параметрического шума.

Для системы (80) проведен анализ оценки (78) сдвига δ в зависимости от параметра $\varepsilon = \sigma_1$. На рис. 35 представлены графики: точной функции $\delta(\sigma_1)$, ее первого и второго приближений, найденных из разложения (78).

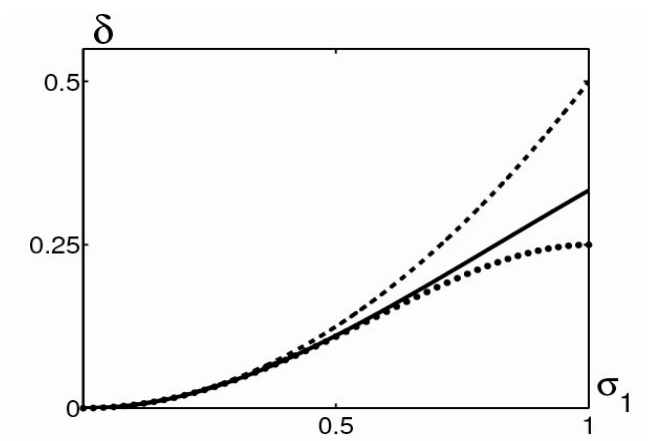


Рисунок 35 — Оценка сдвига стохастического аттрактора $\delta(\sigma_1)$ для линейной системы (80) точная функция $\delta(\sigma_1)$ (сплошная), первое приближение (пунктир), второе приближение (точки).

1.2. Квадратичная стохастическая система

Рассмотрим систему с квадратичной нелинейностью

$$dx = x(\mu - x)dt$$

У этой детерминированной системы существуют две точки покоя $\bar{x}_1 = 0$ и $\bar{x}_2 = \mu$. При значении параметра $\mu < 0$ точка покоя $\bar{x}_1 = 0$ устойчива, а точка покоя $\bar{x}_2 = \mu$ неустойчива. При $\mu > 0$ равновесие $\bar{x}_1 = 0$ неустойчиво, а при $\bar{x}_2 = \mu$ устойчиво. На рис. 9 представлена бифуркационная диаграмма.

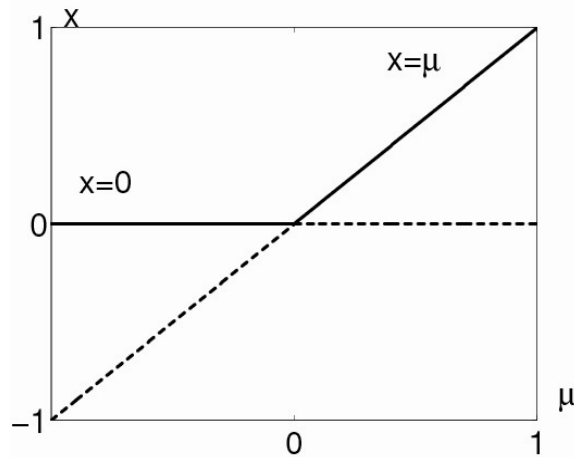


Рисунок 36 — Бифуркационная диаграмма системы с квадратичной нелинейностью. Устойчивые равновесия указаны сплошной линией, неустойчивые — пунктирной.

Рассмотрим эту систему в интерпретации Стратоновича

$$dx = x(\mu - x)dt + \sigma_1 x \circ dw_1 + \sigma_2 \circ dw_2, \quad (81)$$

где w_1, w_2 — независимые стандартные винеровские процессы, $\sigma_1 > 0$ — интенсивность мультипликативного шума, $\sigma_2 > 0$ — интенсивность аддитивного шума.

Уравнения Фоккера-Планка-Колмогорова для (81) имеет решение

$$\rho(x) = K(\sigma_1^2 x^2 + \sigma_2^2)^{\frac{\mu-1}{\sigma_1^2-2}} \exp\left(-\frac{2}{\sigma_1} x + \frac{2\sigma_2}{\sigma_1^3} \arctan \frac{\sigma_1 x}{\sigma_2}\right), \text{ где } K - \text{константа интегрирования.}$$

Интеграл $\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx$ в данном случае всегда расходится. Это означает, что в системе с аддитивным шумом не существует регулярного стохастического аттрактора. В этом случае траектории стохастической системы уходят в бесконечность. На рис. 37 представлены случайные траектории системы, в присутствии аддитивных и мультипликативных помех. Пунктиром указано детерминированное решение. Некоторое время случайные траектории

системы колеблются вблизи детерминированного равновесия $\bar{x} = \mu$, а затем резко уходят в минус-бесконечность.

Рассмотрим систему (81) лишь с невырожденным мультипликативным шумом ($\sigma_1 \neq 0$,

$$\sigma_2 = 0) \quad dx = x(\mu - x)dt + \frac{1}{2}\sigma_1^2 x dt + \sigma_1 x dw_1.$$

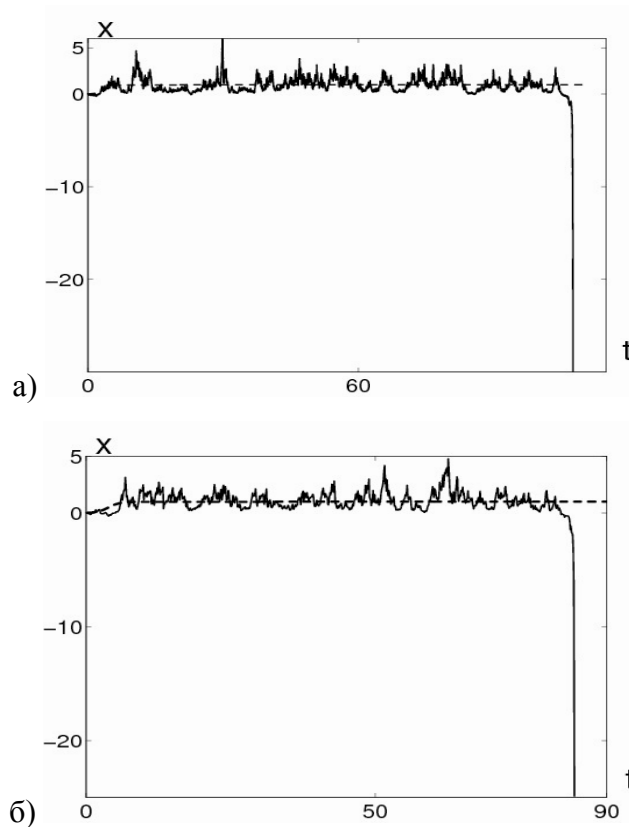


Рисунок 37 — Случайные траектории системы при $\mu = 1$, $\sigma_2 = 0.2$ для а) $\sigma_1 = 0.2$, б) $\sigma_1 = 0.9$.

Тогда решением уравнения Фоккера-Планка-Колмогорова является функция $\rho(x) = Kx^{\frac{2\mu}{\sigma_1^2}-1} e^{-\frac{2}{\sigma_1^2}x}$, с константой интегрирования $K > 0$. При $\mu > 0$ на инвариантном множестве $(0, +\infty)$ этой стохастической системы существует стационарная плотность распределения, т.е. существует стохастический аттрактор. Стационарная плотность в этом случае имеет распределение Вейбулла. Производная обращается в ноль в единственной точке $\tilde{x} = \mu - \frac{\sigma_1^2}{2}$, где концентрируются случайные траектории системы. На рис. 38 представлены случайные траектории системы при фиксированном значении параметра $\mu = 1$

и четырех значениях параметра мультипликативного шума $\sigma_1 = 0.2$ (сплошная), $\sigma_1 = 0.5$ (пунктир), $\sigma_1 = 1$ (точка-тире), $\sigma_1 = 2$ (точки). Пунктиром указано детерминированное решение. Увеличение мультипликативного шума σ_1 при положительных значениях параметра μ сдвигает точку экстремума функции $\rho(x)$ на величину $\frac{\sigma_1^2}{2}$ в направлении неустойчивого равновесия $\bar{x}_1 = 0$.

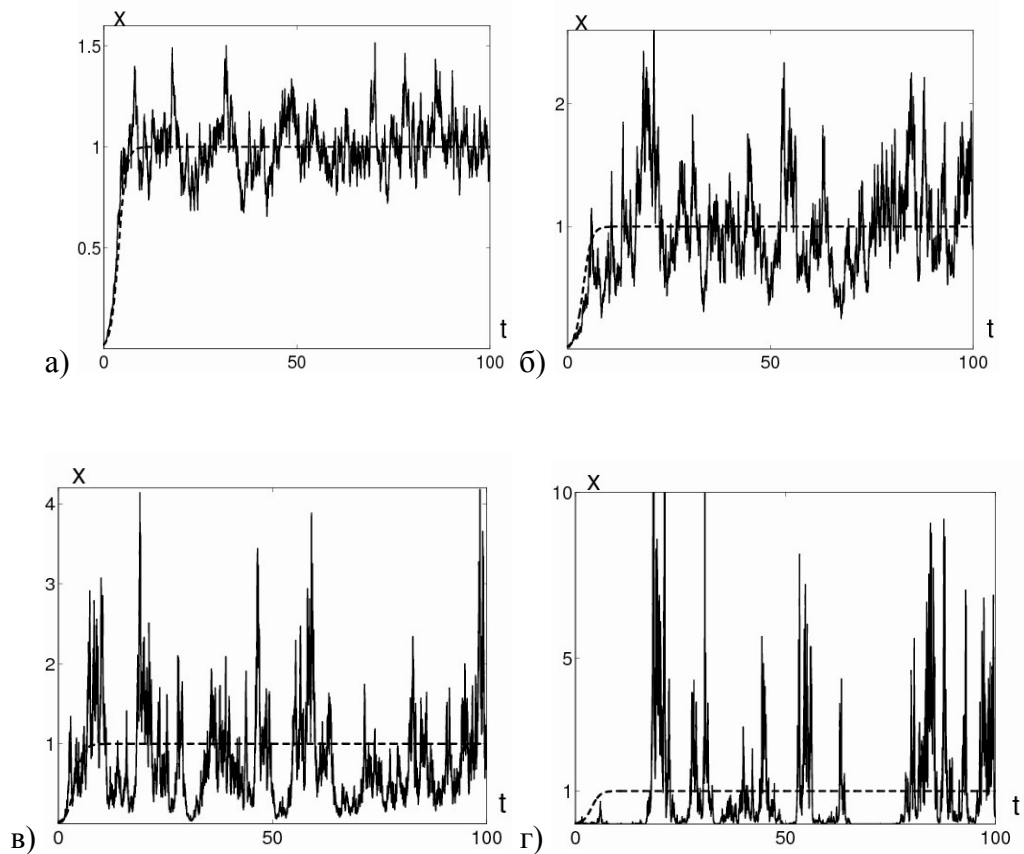


Рисунок 38 — Случайные траектории системы (7) (сплошная) при $\mu = 1$ для а) $\sigma_1 = 0.2$, б) $\sigma_1 = 0.5$, в) $\sigma_1 = 1$, г) $\sigma_1 = 2$.

В зависимости от значений параметров стационарная плотность распределения $\rho(x)$ имеет три качественно различные формы. При $\frac{2\mu}{\sigma_1^2} < 1$ функция $\rho(x)$ имеет $\lim_{x \rightarrow +0} \rho(x) = \infty$ и монотонно убывает на $(0, +\infty)$ (рис. 39 сплошная). При $\frac{2\mu}{\sigma_1^2} = 1$ функция $\rho(x)$ монотонно убывает на интервале $(0, +\infty)$ и имеет в нуле конечное значение (рис. 39, пунктир). Если

$\frac{2\mu}{\sigma_1^2} > 1$, то $\rho(0) = 0$, функция $\rho(x)$ перестает быть монотонной, и имеет на $(0, +\infty)$ максимум в точке $\tilde{x} = \mu - \frac{\sigma_1^2}{2}$ (рис. 39 точки, крестики).

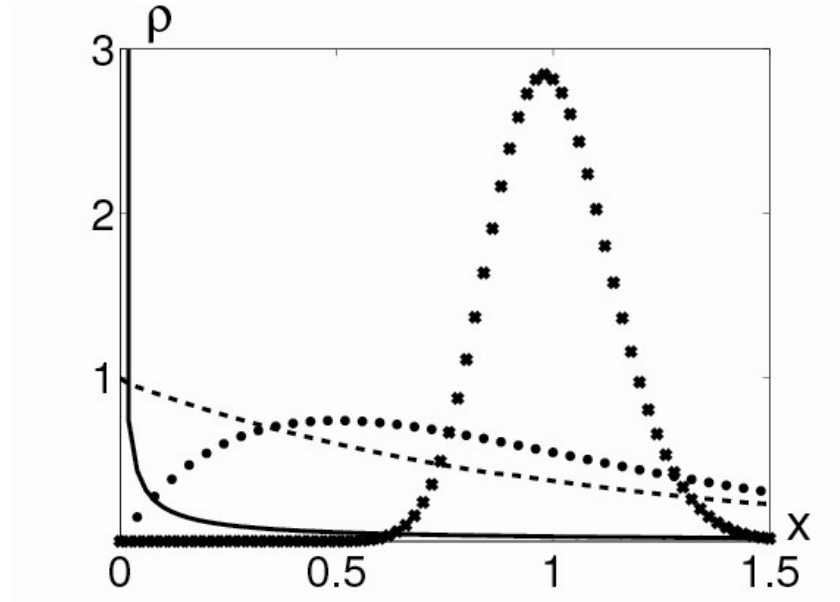


Рисунок 39 — Функция плотности распределения системы (7) при $\mu = 1$ для $\sigma_1 = 0.2$ (крестики), $\sigma_1 = 1$ (точки), $\sigma_1 = \sqrt{2}$ (пунктир), $\sigma_1 = 3$ (сплошная).

При $\mu < \frac{\sigma_1^2}{2}$, то плотность распределения неограниченно возрастает в нуле, случайные траектории системы концентрируются вблизи равновесия $\bar{x}_1 = 0$. Это можно интерпретировать как стабилизацию неустойчивого равновесия системы, вызванную увеличением мультипликативного шума.

Для системы (81) проведен анализ оценки (78) сдвига δ в зависимости от параметра $\varepsilon = \sigma_1$. Для этой системы справедлива точная формула $\delta = \frac{\sigma_1^2}{2}$.

Таким образом, в системах с единственным детерминированным аттрактором (в рассмотренных примерах — устойчивое равновесие) сдвиг соответствующего стохастического аттрактора возможен лишь при воздействии параметрических возмущений. Изменение интенсивности аддитивного шума может привести только к изменению ширины пиков плотности.

5. Стохастический анализ переходов между аттракторами, вызванных случайными возмущениями

Важной чертой многих нелинейных систем является мультистабильность – наличие нескольких сосуществующих аттракторов. В детерминированном случае бассейны притяжения этих аттракторов разделены сепаратрисами. При этом переход траектории из одного бассейна в другой невозможен. В стохастическом случае ситуация принципиально меняется. Под действием случайных возмущений траектория может перейти из одного бассейна в другой и далее вновь вернуться обратно. Таким образом шумы перемешивают бассейны притяжения и порождают стохастические режимы динамики, не имеющие аналогов в детерминированном случае.

1. Кубическое стохастическое уравнение

Рассмотрим систему с кубической нелинейностью

$$dx = x(\mu - x^2)dt \quad (82)$$

У этой детерминированной системы существуют три точки покоя $\bar{x}_1 = 0$, $\bar{x}_2 = \sqrt{\mu}$ и $\bar{x}_3 = -\sqrt{\mu}$. При значении параметра $\mu < 0$ единственная точка покоя $\bar{x}_1 = 0$ устойчива. При $\mu > 0$ положение $\bar{x}_1 = 0$ теряет устойчивость и появляется пара устойчивых равновесий $\bar{x}_2 = \sqrt{\mu}$, $\bar{x}_3 = -\sqrt{\mu}$ (мультистабильность). На рис. 13 представлена бифуркационная диаграмма детерминированной системы.

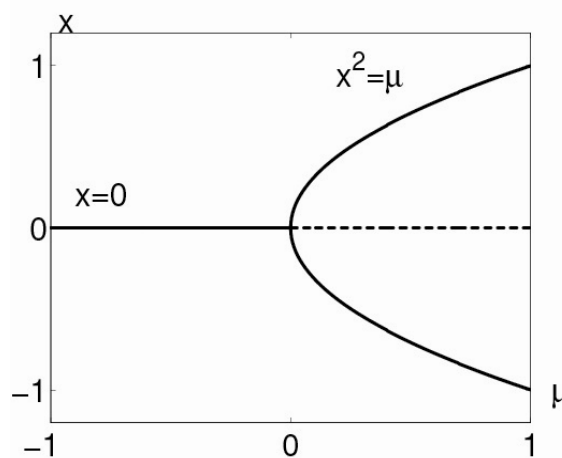


Рисунок 40 — Бифуркационная диаграмма системы с кубической нелинейностью. Устойчивые равновесия указаны сплошной линией, неустойчивые – пунктиром.

Рассмотрим стохастическое уравнение Стратоновича

$$dx = x(\mu - x^2)dt + \sigma_1 x \circ dw_1 + \sigma_2 \circ dw_2, \quad (83)$$

где w_1, w_2 – независимые стандартные винеровские процессы, $\sigma_1 > 0$ – интенсивность мультипликативного шума, $\sigma_2 > 0$ – интенсивность аддитивного шума.

Рассмотрим случай воздействия на систему (83) только аддитивного шума ($\sigma_1 = 0$).

Решением уравнения Фоккера-Планка-Колмогорова является функция $\rho = Ke^{\frac{1}{\sigma_2^2}(\mu x^2 - \frac{1}{2}x^4)}$, с константой интегрирования $K > 0$. В области значения параметра $\mu < 0$ функция плотности распределения $\rho(x)$ имеет единственный экстремум (максимум) в точке $\tilde{x} = 0$. Аттрактором системы (83) является стохастическая точка покоя. Увеличение интенсивности аддитивного шума σ_2 ведет к увеличению разброса случайных траекторий вокруг детерминированного равновесия $\tilde{x}_1 = 0$. На рис. 41 представлены траектории системы для значения параметра $\mu = -1$ при значениях аддитивного шума $\sigma_2 = 0.01$, $\sigma_2 = 0.05$, $\sigma_2 = 0.1$. Пунктиром указано детерминированное решение.

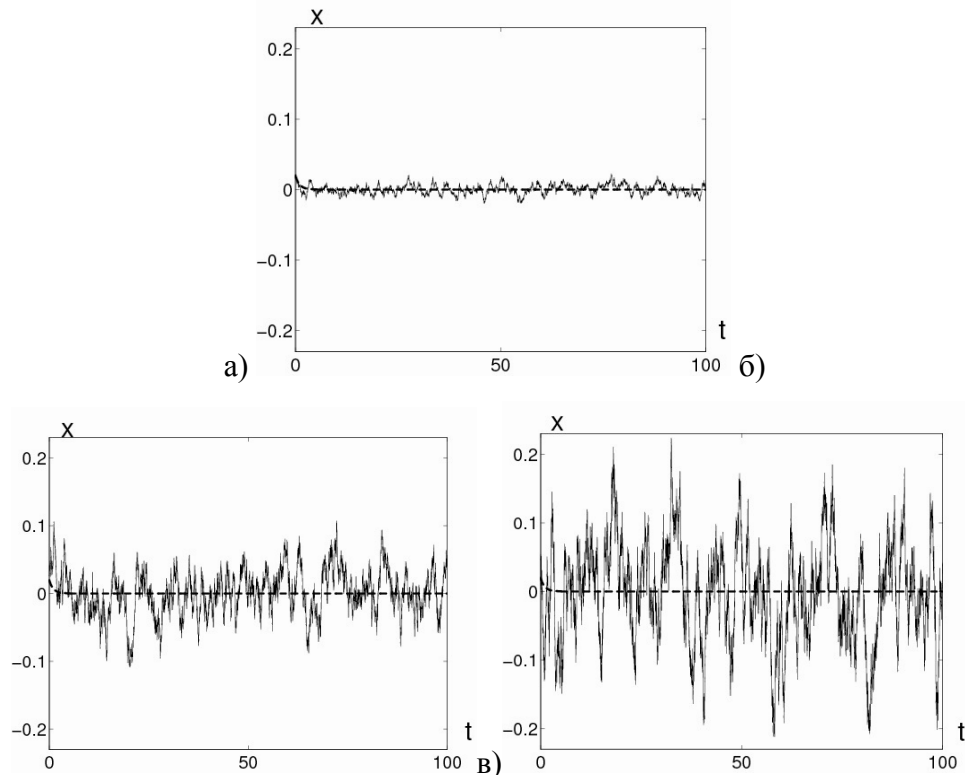


Рисунок 41 — Случайные траектории системы (сплошная) при $\mu = -1$ для а) $\sigma_2 = 0.01$, б) $\sigma_2 = 0.05$, в) $\sigma_2 = 0.1$.

На рис. 42 а) представлены графики функции плотности распределения $\rho(x)$ при $\mu = -1$, $\sigma_2 = 0.005$ (сплошная), $\sigma_2 = 0.02$ (пунктир), $\sigma_2 = 0.2$ (точка). Изменение аддитивного шума σ_2 не меняет положение локального экстремума функции плотности распределения $\rho(x)$.

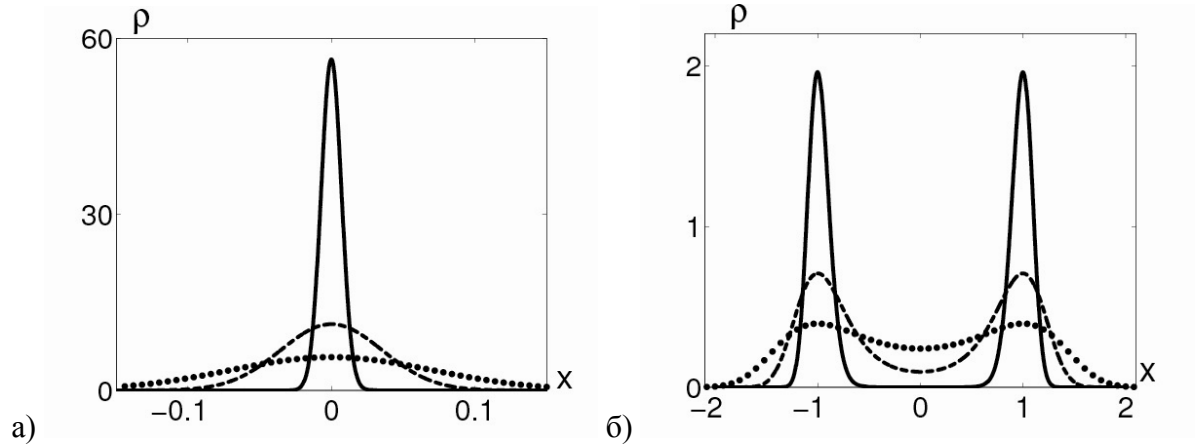


Рисунок 42 — Функция плотности распределения при $\sigma_2 = 0.01$ (сплошная), $\sigma_2 = 0.05$ (пунктир), $\sigma_2 = 0.1$ (точки) для а) $\mu = -1$, б) $\mu = 1$.

При $\mu > 0$, в зоне мультистабильности, функция плотности распределения $\rho(x)$ имеет экстремумы в точках $\tilde{x} = 0$ (точка минимума), $\tilde{x} = \sqrt{\mu}$ и $\tilde{x} = -\sqrt{\mu}$ (точки максимума). На рис. 42 б) представлены графики функции плотности распределения $\rho(x)$ при $\mu = 1$, $\sigma_2 = 0.2$ (сплошная), $\sigma_2 = 0.5$ (пунктир), $\sigma_2 = 1$ (точка). Изменение аддитивного шума σ_2 также не меняет положение локальных экстремумов функции плотности распределения $\rho(x)$.

На рис. 43 представлены случайные траектории системы для значения параметра $\mu = 1$ при значениях аддитивного шума $\sigma_2 = 0.2$, $\sigma_2 = 0.5$, $\sigma_2 = 1$. Пунктиром указаны детерминированные решения. Случайные траектории системы некоторое время локализируются вблизи одного детерминированного равновесия ($\bar{x}_3 = -\sqrt{\mu}$), а затем резко меняют место локализации на окрестность другого детерминированного равновесия ($\bar{x}_2 = \sqrt{\mu}$).

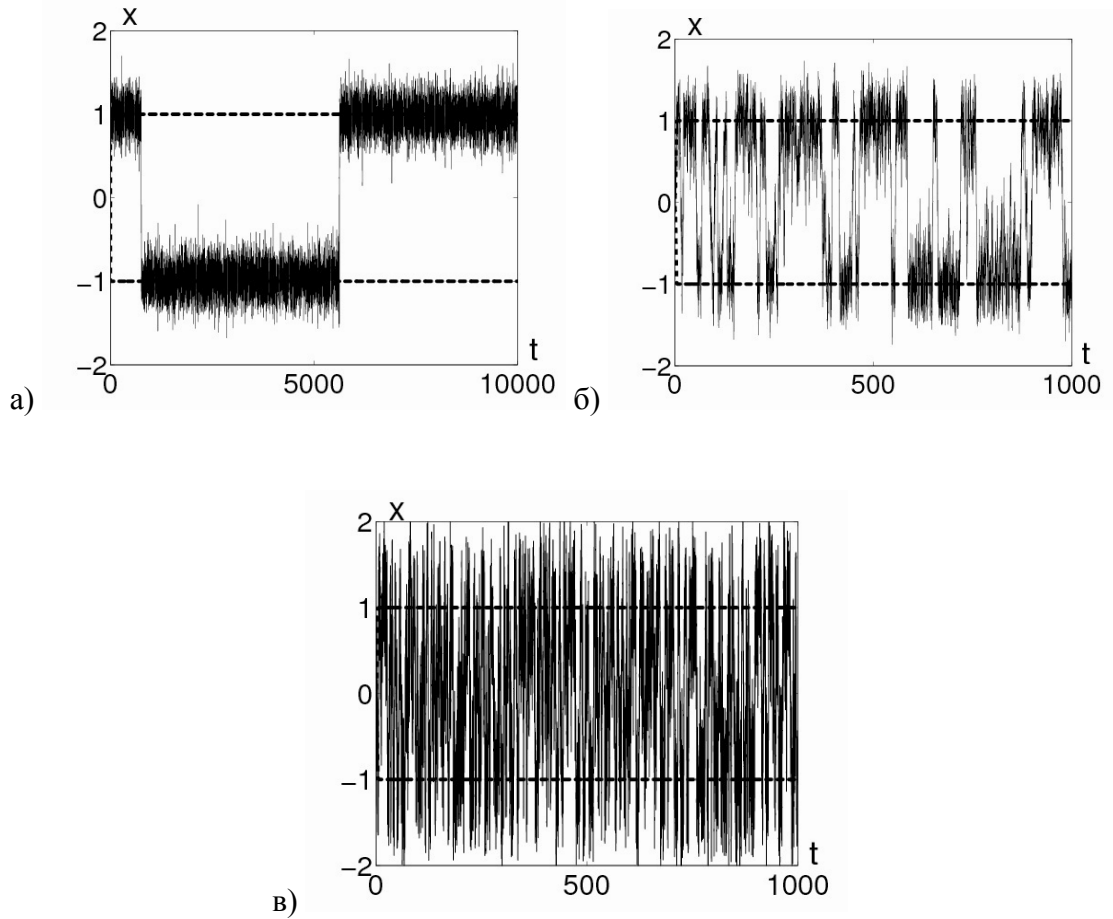


Рисунок 43 — Случайные траектории системы (сплошная) при $\mu = 1$ для а) $\sigma_2 = 0.2$, б) $\sigma_2 = 0.5$, в) $\sigma_2 = 1$.

Как видим, если у детерминированной системы имеется два сосуществующих устойчивых равновесия, то под действием случайных возмущений, решения стохастической системы начинают переходить из окрестности одного равновесия в окрестность другого. Такие индуцированные шумом случайные колебания можно интерпретировать как стохастический цикл. Увеличение аддитивного шума уменьшает время нахождения случайных траекторий в окрестности одного равновесия и увеличивает частоту перехода от одного равновесия к другому.

Рассмотрим случай, когда на систему (82) наряду с аддитивным действует невырожденный мультипликативный шум ($\sigma_1 > 0$, $\sigma_2 > 0$). Тогда решение уравнения

Фоккера-Планка-Колмогорова имеет вид $\rho(x) = K(\sigma_1^2 x^2 + \sigma_2^2)^{\frac{\sigma_1^2 \mu + \sigma_2^2}{\sigma_1^4} - \frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{\sigma_1^4}(\sigma_1^2 x^2 + \sigma_2^2)}$, где $K > 0$ — константа интегрирования. Производная функции плотности распределения может

обращается в ноль в точках $\tilde{x}_1 = 0$, $\tilde{x}_2 = \sqrt{\mu - \frac{\sigma_1^2}{2}}$ и $\tilde{x}_3 = -\sqrt{\mu - \frac{\sigma_1^2}{2}}$. Анализ этих множеств приводит к следующим результатам.

При $\mu \leq \frac{\sigma_1^2}{2}$ функция $\rho(x)$ имеет единственный максимум в точке $\tilde{x}_1 = 0$. В этом случае, аттрактором системы (82) является *стохастическое равновесие*.

При $\mu > \frac{\sigma_1^2}{2}$ функция $\rho(x)$ имеет максимумы в точках $\tilde{x}_2 = \sqrt{\mu - \frac{\sigma_1^2}{2}}$ и $\tilde{x}_3 = -\sqrt{\mu - \frac{\sigma_1^2}{2}}$ и минимум в точке $\tilde{x}_1 = 0$. Тип аттрактора – *стохастический предельный цикл*.

Таким образом, расположение экстремумов функции $\rho(x)$ не зависит от аддитивного шума и определяется лишь интенсивностью σ_1 мультипликативного шума и параметром системы μ . Изменение интенсивности σ_1 параметрического шума сдвигает точки экстремума функции плотности распределения. Присутствие мультипликативного шума изменяет точку бифуркации от $\mu = 0$ (для детерминированной системы) к $\mu = \frac{\sigma_1^2}{2}$ (для стохастической). На рис. 44 показана бифуркационная диаграмма стохастической системы (83). Кривая $\mu = \frac{\sigma_1^2}{2}$ разделяет пространство параметров на две области – унимодальную (1) и бимодальную (2). В области (1) с унимодальной формой $\rho(x)$ случайные траектории системы концентрируются вокруг точки $\tilde{x}_1 = 0$. В области (2) с бимодальной формой $\rho(x)$ случайные траектории имеют две точки концентрации $\tilde{x}_2 = \sqrt{\mu - \frac{\sigma_1^2}{2}}$ и $\tilde{x}_3 = -\sqrt{\mu - \frac{\sigma_1^2}{2}}$. При этом, наблюдаются случайные переходы из окрестности \tilde{x}_2 в окрестность \tilde{x}_3 и обратно. При переходе параметра через границу $\mu = \frac{\sigma_1^2}{2}$ происходит качественное изменение формы $\rho(x)$. Это явление получило название Р-бифуркации [109].

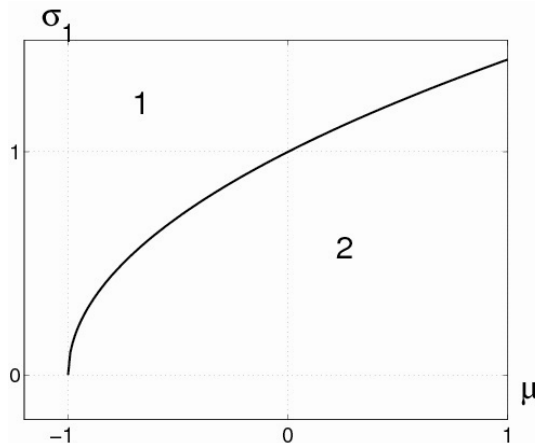


Рисунок 44 — Бифуркационная диаграмма стохастической системы с кубической нелинейностью. Зона 1 – "стохастическое равновесие", зона 2 – "стохастический цикл".

Для каждого фиксированного значения параметра $\mu > 0$ увеличение σ_1 приводит к переходу от стохастического предельного цикла ($0 < \sigma_1 < \sqrt{2\mu}$) к стохастической точке покоя ($\sigma_1 > \sqrt{2\mu}$). Таким образом, в точке $\sigma_1 = \sqrt{2\mu}$ происходит качественное изменение динамики системы. Если в детерминированном случае при движении слева направо вдоль оси μ происходит расщепление аттрактора на два, график функции плотности распределения меняет форму с унимодальной на бимодальную, т.е. в системе происходит так называемая *"прямая стохастическая бифуркация"*. В стохастической системе, при увеличении интенсивности мультипликативного шума σ_1 , форма графика функции плотности $\rho(x)$ меняется от бимодальной к унимодальной и это можно интерпретировать как *"обратную стохастическую бифуркацию"*. Особенности в поведении функции плотности распределения $\rho(x)$ при изменении параметров σ_1 и μ демонстрируются на рис. 45.

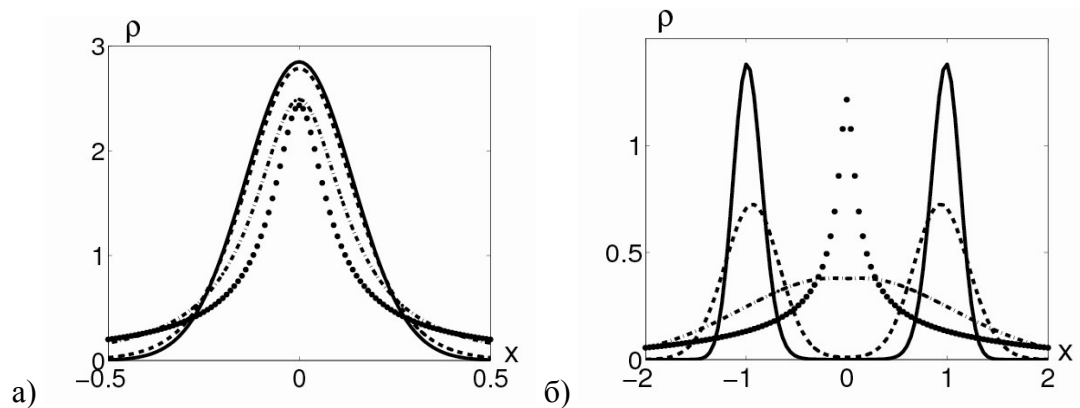


Рисунок 45 — Функция плотности распределения при $\sigma_2 = 0.2$, $\sigma_1 = 0.2$ (сплошная), $\sigma_1 = 0.5$ (пунктир), $\sigma_1 = 1.4$ (точка-тире), $\sigma_1 = 3$ (точки) для а) $\mu = -1$, б) $\mu = 1$.

На рис. 45 а) представлены графики функции $\rho(x)$, при фиксированных значениях параметра $\mu = -1$, аддитивного шума $\sigma_2 = 0.2$, и четырех значениях параметра мультипликативного шума: $\sigma_1 = 0.2$ (сплошная), $\sigma_1 = 0.5$ (пунктир), $\sigma_1 = 1.4$ (точка-тире) и $\sigma_1 = 3$ (точки). Как видим, увеличение параметра мультипликативного шума при $\mu < 0$ качественно не меняет характер поведения системы.

На рис. 45 б) представлены графики функции $\rho(x)$ при фиксированном значении параметра $\mu = 1$, аддитивного шума $\sigma_2 = 0.2$ и четырех значениях параметра мультипликативного шума: $\sigma_1 = 0.2$ (сплошная), $\sigma_1 = 0.5$ (пунктир), $\sigma_1 = 1.4$ (точка-тире) и

$\sigma_1 = 3$ (точки). При увеличении интенсивности параметрического шума бимодальный режим переходит в унимодальный.

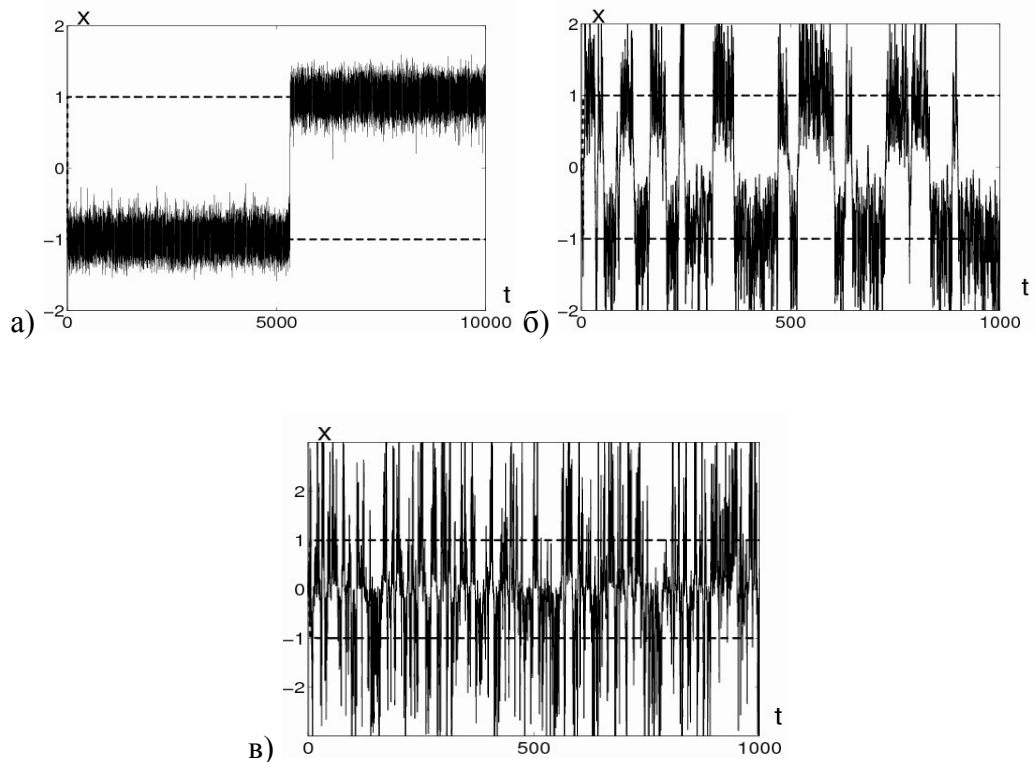


Рисунок 46 — Случайные траектории системы (сплошная) при $\mu = 1$, $\sigma_2 = 0.2$ для а) $\sigma_1 = 0.2$, б) $\sigma_1 = 0.5$, в) $\sigma_1 = 1$.

На рис. 46 представлены случайные траектории системы (9) при фиксированном значении параметров $\mu = 1$, $\sigma_2 = 0.2$, для различных значений интенсивности мультипликативного шума а) $\sigma_1 = 0.2$, б) $\sigma_1 = 0.5$, в) $\sigma_1 = 1$. Пунктиром указаны детерминированные решения.

Таким образом, в системе с кубической нелинейностью, вариация интенсивности параметрического шума приводит к качественному изменению формы стохастических аттракторов, в то время, как изменение интенсивности аддитивного шума качественно не изменяет форму функции $\rho(x)$.

В зависимости от параметра $\varepsilon = \sigma_1$ для системы (80) проведен анализ оценки (78) сдвига δ . На рис. 47 для системы (83) представлены графики: точной функции $\delta(\sigma_1)$, ее первого и второго приближений, найденных из разложения (78).

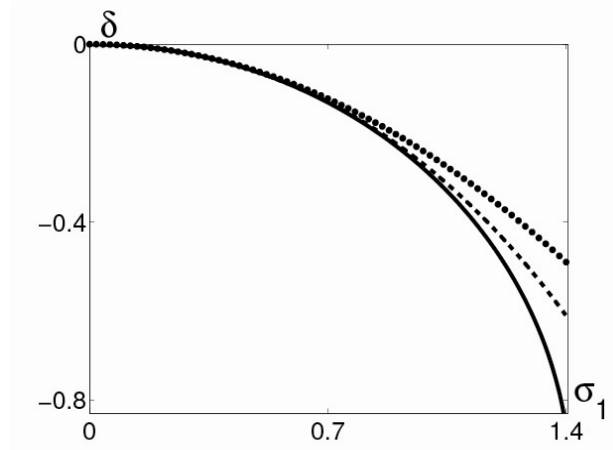


Рисунок 47 — Оценка сдвига стохастического аттрактора $\delta(\sigma_1)$ для кубической системы (9) точная функция $\delta(\sigma_1)$ (сплошная), первое приближение (пунктир), второе приближение(точки).

2. Двумерные система Хопфа (жесткий режим)

Будем рассматривать систему Хопфа (жесткий режим) под воздействием внешних аддитивных и параметрических шумов. Исходная детерминированная система имеет вид

$$\begin{cases} dx = (x(\mu + 2x^2 + 2y^2 - (x^2 + y^2)^2) - y)dt, \\ dy = (y(\mu + 2x^2 + 2y^2 - (x^2 + y^2)^2) + x)dt. \end{cases} \quad (84)$$

При значении параметра $\mu < -1$ единственным аттрактором системы является устойчивая точка покоя $(0,0)$. При $\mu = -1$ наряду с существующей точкой покоя появляется полуустойчивый предельный цикл $x^2 + y^2 = 1$. При $-1 < \mu < 0$ система (84) имеет два устойчивых аттрактора – равновесие $(0,0)$ и цикл $x^2 + y^2 = 1 + \sqrt{1 + \mu}$ (мультистабильность) и один неустойчивый – цикл $x^2 + y^2 = 1 - \sqrt{1 + \mu}$. При $\mu = 0$ происходит слияние внутреннего цикла с точкой покоя. В результате, при $\mu > 0$ система имеет неустойчивое равновесие $(0,0)$ и устойчивый предельный цикл. На рис. 48 представлена бифуркационная диаграмма величины $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, где для системы (84) устойчивые состояния изображены сплошными линиями, неустойчивые – пунктирами.

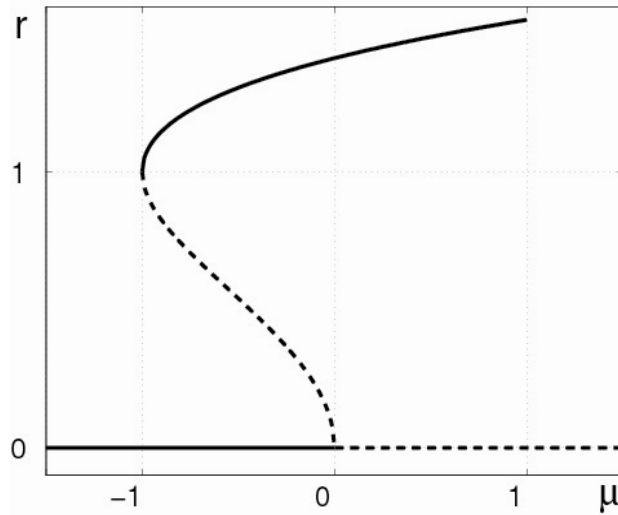


Рисунок 48 — Бифуркационная диаграмма детерминированной системы.

Добавим в систему (84) случайные возмущения. Рассмотрим соответствующую стохастическую систему уравнений Стратоновича

$$\begin{cases} dx = (x(\mu + 2x^2 + 2y^2 - (x^2 + y^2)^2) - y)dt + \sigma_1 x \circ dw_1 + \sigma_2 \circ dw_2, \\ dy = (y(\mu + 2x^2 + 2y^2 - (x^2 + y^2)^2) + x)dt + \sigma_1 y \circ dw_1 + \sigma_3 \circ dw_3, \end{cases} \quad (85)$$

где w_i ($i=1,2,3$) — независимые стандартные винеровские процессы, $\sigma_1 \geq 0$ — интенсивность параметрического (мультипликативного) шума, $\sigma_2 \geq 0$ и $\sigma_3 \geq 0$ — интенсивности аддитивных шумов.

В результате перехода в полярные координаты и введя новые винеровские процессы w_r и w_φ можно записать в следующем виде

$$\begin{cases} dr = ((\mu + 2r^2 - r^4)r + r \frac{\sigma_1^2}{2} + \frac{\sigma_2^2}{2r})dt + r\sigma_1 dw_1 + \sigma_2 dw_r, \\ d\varphi = dt + \frac{1}{r}\sigma_2 dw_\varphi. \end{cases}$$

В этой системе переменная r не зависит от φ . Решение уравнения Фоккера-Планка-Колмогорова для стационарной плотности распределения $\rho(r)$ может быть найдено аналитически. Функция $\rho(r)$ является исчерпывающей вероятностной характеристикой стохастических аттракторов системы (85). Исследуем отдельно случаи воздействия аддитивного и мультипликативного шумов.

Рассмотрим случай, когда на систему Хопфа действует только аддитивный шум ($\sigma_1 = 0, \sigma_2 \neq 0$). Тогда стационарной плотности распределения является функция $\rho(r) = N \exp\left(\frac{3\mu r^2 + 3r^4 - r^6}{3\sigma_2^2}\right)$, где $N > 0$ – константа интегрирования. Для стационарной плотности распределения $p(x, y)$ системы Хопфа (11) в декартовых координатах x и y получим $p(x, y) = K \exp\left(\frac{3\mu(x^2 + y^2) + 3(x^2 + y^2)^2 - (x^2 + y^2)^3}{3\sigma_2^2}\right)$ с константой интегрирования $K > 0$.

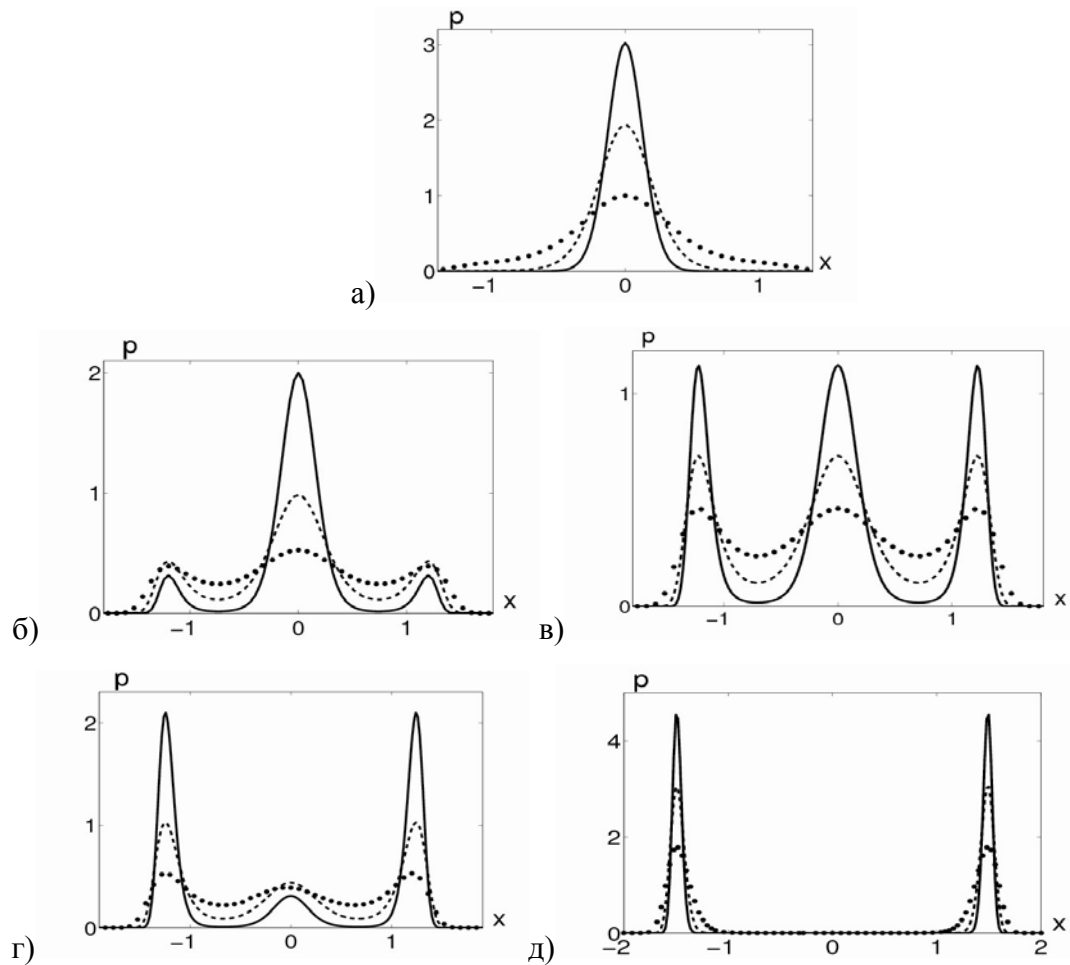


Рисунок 49 — Графики функции $p(x, 0)$ при $\sigma_1 = 0$, $\sigma_2 = 0.2$ (сплошная), $\sigma_2 = 0.3$ (пунктир), $\sigma_2 = 0.5$ (точки) для а) $\mu = -1.2$, б) $\mu = -0.8$, в) $\mu = -0.75$, г) $\mu = -0.7$, д) $\mu = 0.5$.

На рис. 49 представлены графики функции $p(x, 0)$ для пяти значений параметра $\mu = -1.2, \mu = -0.8, \mu = -0.75, \mu = -0.7, \mu = 0.5$, при значениях интенсивности аддитивного шума $\sigma_2 = 0.2, \sigma_2 = 0.3, \sigma_2 = 0.5$.

Проведем анализ функции плотности распределения $p(x, y)$ в зависимости от параметров μ и σ_2 . Экстремумы функции $p(x, y)$ удовлетворяют следующим равенствам достигаются в следующих точках фазовой плоскости $x = y = 0$, $x^2 + y^2 = 1 + \sqrt{\mu + 1}$, $x^2 + y^2 = 1 - \sqrt{\mu + 1}$. Анализ этих множеств приводит к следующим результатам.

При $\mu \leq -1$ функция $p(x, y)$ имеет единственный максимум в точке $(0, 0)$. Случайные траектории системы Хопфа под воздействием аддитивных помех концентрируются вблизи точки $(0, 0)$. Аттрактором является *стохастическая точка покоя*.

При $\mu \geq 0$ функция $p(x, y)$ достигает максимума в точках детерминированного цикла $x^2 + y^2 = 1 + \sqrt{\mu + 1}$ и имеет единственный минимум в точке $(0, 0)$. Случайные траектории системы Хопфа под воздействием аддитивных помех концентрируются вблизи точек окружности $x^2 + y^2 = 1 + \sqrt{\mu + 1}$. Аттрактором является *стохастический предельный цикл*.

При $-1 < \mu < 0$ функция $p(x, y)$ имеет три экстремума. Локальный минимум функции достигается при $x^2 + y^2 = 1 - \sqrt{\mu + 1}$ и два локальных максимума достигаются при $x = y = 0$, $x^2 + y^2 = 1 + \sqrt{\mu + 1}$. Случайные состояния системы Хопфа под воздействием аддитивных помех распределяются между точкой $(0, 0)$ и детерминированным циклом $x^2 + y^2 = 1 + \sqrt{\mu + 1}$. В этом случае, сосуществуют одновременно *стохастическая точка покоя* и *стохастический предельный цикл*.

На интервале $\mu \in (-1, 0)$ в графиках сечений плотности $p(x, 0)$ наблюдаются три пика. Средний пик связан с повышенной концентрацией случайных состояний вблизи равновесия, а крайние – в окрестности цикла. При $\mu = -0.75$ максимальные значения плотности распределения $p(x, y)$ для равновесия $(0, 0)$ и цикла $x^2 + y^2 = 1 + \sqrt{\mu + 1}$ совпадают (рис. 49 в).

На интервале $-1 < \mu < -0.75$ в стационарной плотности распределения доминирует стохастическое равновесие. Чем ближе μ к -1 , тем вес стохастического равновесия больше (рис. 49 б). На интервале $-0.75 < \mu < 0$ уже доминирует стохастический цикл. При стремлении μ к нулю вес стохастического равновесия уменьшается (рис. 49 г). При изменении параметра μ от -1 до 0 высота P_e пика плотности $p(x, 0)$ соответствующего равновесию уменьшается и, одновременно увеличивается высота P_c крайних пиков, характеризующих стохастический цикл.

Изменение интенсивности σ_2 аддитивного шума не меняет положение локальных экстремумов функции плотности распределения. Увеличение аддитивного шума приводит к увеличению разброса случайных траекторий системы Хопфа вокруг детерминированных аттракторов (т.е. вокруг устойчивой точки покоя $(0,0)$ при $\mu \leq -1$, вокруг устойчивой точки покоя $(0,0)$ и устойчивого предельного цикла $x^2 + y^2 = 1 + \sqrt{\mu + 1}$ при $-1 < \mu < 0$ и вокруг устойчивого предельного цикла $x^2 + y^2 = 1 + \sqrt{\mu + 1}$ при $\mu \geq 0$). Заметим, что бифуркационные значения $\mu_1 = -1$ и $\mu_2 = 0$ детерминированной системы Хопфа являются точками, при которых форма графика $p(x, y)$ претерпевает качественные изменения – происходит Р-бифуркация [109]. Таким образом, в отсутствии параметрических шумов, точки бифуркации детерминированной системы являются одновременно точками бифуркации и системы с аддитивными помехами. Иными словами, аддитивный шум не меняет расположения точек бифуркации.

Рассмотрим случай, когда на систему действует невырожденный мультипликативный шум ($\sigma_1 \neq 0$). В этом случае стационарная плотность распределения в декартовых координатах

имеет

вид

$$p(x, y) = K \exp \left(-\frac{1}{2\sigma_1^2} (x^2 + y^2)^2 + \left(\frac{2}{\sigma_1^2} + \frac{\sigma_2^2}{\sigma_1^4} \right) (x^2 + y^2) \right) (\sigma_1^2 (x^2 + y^2) + \sigma_2^2)^\alpha, \quad \text{где}$$

$$\alpha = \frac{\mu}{\sigma_1^2} - \frac{2\sigma_2^2}{\sigma_1^4} - \frac{\sigma_2^4}{\sigma_1^6} - 1 \quad \text{и константы интегрирования } K > 0 \quad \text{и } N > 0. \quad \text{Экстремумы этой}$$

функции могут достигаться в следующих точках фазовой плоскости

$$x = y = 0, \quad x^2 + y^2 = 1 + \sqrt{\mu + 1 - \sigma_1^2}, \quad x^2 + y^2 = 1 - \sqrt{\mu + 1 - \sigma_1^2}.$$

Анализ этих множеств приводит к следующим результатам.

При $\mu \leq -1 + \sigma_1^2$ функция $p(x, y)$ имеет единственный максимум в точке $(0,0)$. В этом случае, аттрактором системы Хопфа (85) является *стохастическая точка покоя* $(0,0)$.

При $-1 + \sigma_1^2 < \mu \leq \sigma_1^2$ функция $p(x, y)$ имеет три экстремума одновременно. Локальный минимум функции достигается при $x^2 + y^2 = 1 - \sqrt{\mu + 1 - \sigma_1^2}$. Два локальных максимума достигаются при $x = y = 0$, $x^2 + y^2 = 1 + \sqrt{\mu + 1 - \sigma_1^2}$. Случайные состояния системы Хопфа (85) распределяются между точкой $(0,0)$ и стохастическим циклом с радиусом

$$r_s = \sqrt{1 + \sqrt{\mu + 1 - \sigma_1^2}}.$$

При $\mu > \sigma_1^2$ функция $p(x, y)$ достигает максимума в точках стохастического цикла $x^2 + y^2 = 1 + \sqrt{\mu + 1 - \sigma_1^2}$ и имеет единственный минимум в точке $(0, 0)$. Тип аттрактора – *стохастический предельный цикл*.

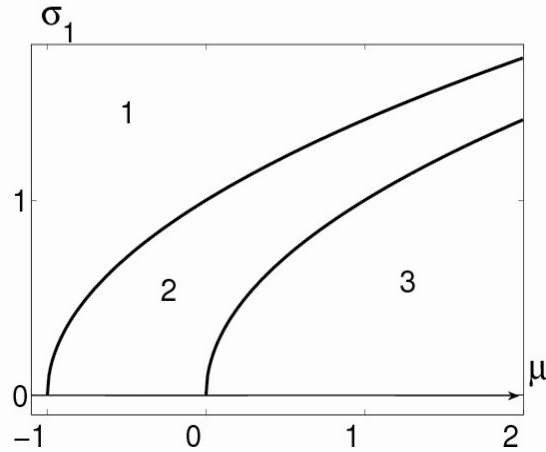


Рисунок 50 — Бифуркационная диаграмма возмущенной системы. Зона 1 – "стохастическое равновесие", зона 2 – "стохастическое равновесие и предельный цикл", зона 3 – "стохастический предельный цикл".

Как видим, расположение экстремумов функции $p(x, y)$ не зависит от аддитивного шума и определяется исключительно интенсивностью σ_1 мультипликативного шума и параметром μ .

Изменение интенсивности σ_1 параметрического шума сдвигает точки экстремума функции плотности распределения на величину σ_1^2 . Таким образом, присутствие мультипликативного шума изменяет точки бифуркации от $\mu_1 = -1$ и $\mu_2 = 0$ к $\mu_1 = -1 + \sigma_1^2$ и $\mu_2 = \sigma_1^2$. На рис. 50 показана бифуркационная диаграмма возмущенной системы Хопфа. Кривые $\mu = -1 + \sigma_1^2$ и $\mu = \sigma_1^2$ являются границами между зонами: 1-ая зона – область параметров $\mu < -1 + \sigma_1^2$, где наблюдается стохастическая точка покоя, 2-ая зона – область $-1 + \sigma_1^2 \leq \mu \leq \sigma_1^2$ сосуществования стохастической точки покоя и стохастического предельного цикла, и 3-я зона – область $\mu > \sigma_1^2$, где наблюдается стохастический предельный цикл.

Очевидно, что для каждого фиксированного значения параметра $\mu > 0$ увеличение σ_1 приводит к переходу от стохастического предельного цикла ($0 < \sigma_1 < \sqrt{\mu}$) к одновременному существованию стохастического предельного цикла и точки покоя ($\sqrt{\mu} < \sigma_1 < \sqrt{\mu + 1}$), а затем

к стохастическому равновесию ($\sigma_1 > \sqrt{\mu+1}$). Таким образом, в точках $\sigma_1 = \sqrt{\mu}$ и $\sigma_1 = \sqrt{\mu+1}$ мы наблюдаем *обратные стохастические бифуркации*.

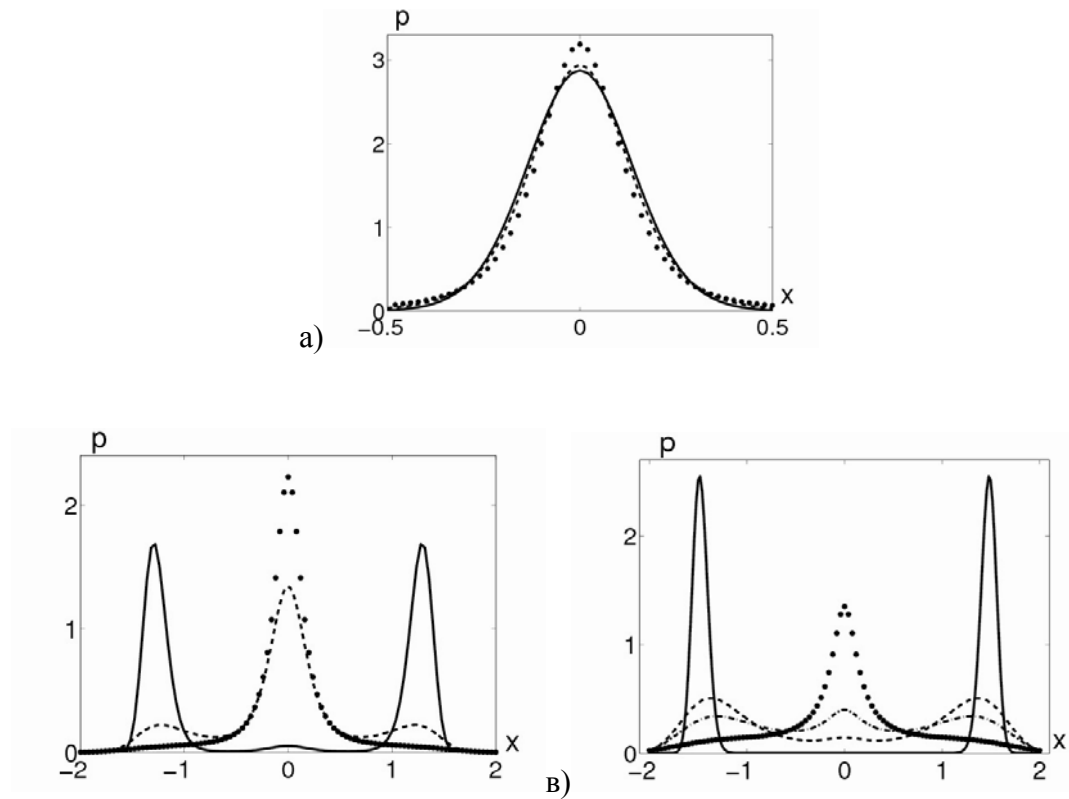


Рисунок 51 — Графики функции p при $\sigma_2 = 0.2$ для а) $\mu = -1.1$, $\sigma_1 = 0$ (сплошная), $\sigma_1 = 0.5$ (пунктир), $\sigma_1 = 1$ (точки); б) $\mu = -0.5$, $\sigma_1 = 0.2$ (сплошная), $\sigma_1 = 0.5$ (пунктир), $\sigma_1 = 1$ (точки); в) $\mu = 0.5$, $\sigma_1 = 0.2$ (сплошная), $\sigma_1 = 0.8$ (пунктир), $\sigma_1 = 1$ (точка-тире), $\sigma_1 = 1.4$ (точки).

На рис. 51 демонстрируется изменение поведения функции плотности распределения p при изменении параметра σ_1 мультипликативного шума. На рис. 51 а) представлен график функции $p(x,0)$ для $\mu = -1.1, \sigma_2 = 0.2$ при трех значениях интенсивности мультипликативного шума $\sigma_1 = 0$ (сплошная), $\sigma_1 = 0.5$ (пунктир), $\sigma_1 = 1$ (точка). Увеличение интенсивности мультипликативного шума ведет к уменьшению разброса случайных траекторий вокруг точки покоя $(0,0)$.

На рис. 51 б) представлен график функции $p(x,0)$ для $\mu = -0.5, \sigma_2 = 0.2$ при трех значениях интенсивности мультипликативного шума $\sigma_1 = 0.2$ (сплошная), $\sigma_1 = 0.5$ (пунктир), $\sigma_1 = 1$ (точки). Увеличение интенсивности мультипликативного шума ведет к уменьшению плотности вероятности случайных траекторий вокруг стохастического

предельного цикла $x^2 + y^2 = 1 + \sqrt{\mu + 1 - \sigma_1^2}$ и к повышению их концентрации в окрестности точки покоя $(0,0)$.

На рис. 51 в) представлен график функции $p(x,0)$ для $\mu = 0.5$, $\sigma_2 = 0.2$ при четырех значениях интенсивности мультипликативного шума $\sigma_1 = 0.2$ (сплошная), $\sigma_1 = 0.8$ (пунктир), $\sigma_1 = 1$ (точка-тире), $\sigma_1 = 1.4$ (точки). Увеличение интенсивности мультипликативного шума сопровождается затуханием автоколебаний и приводит к увеличению концентрации случайных траекторий вокруг точки покоя $(0,0)$. При этом наблюдается стадия сосуществования стохастической точки покоя и стохастического предельного цикла.

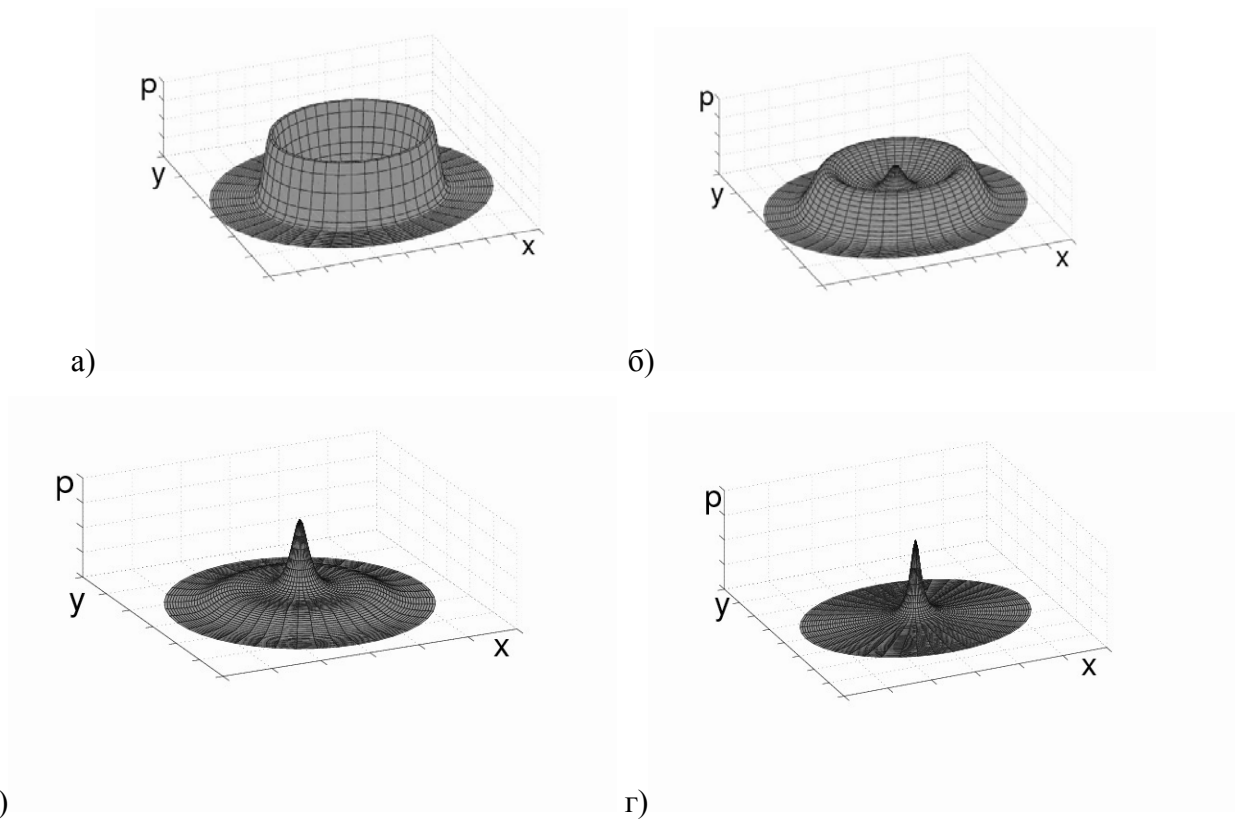


Рисунок 52 — Графики функции $p(x, y)$ при $\mu = 0.1$, $\sigma_2 = 0.2$ для а) $\sigma_1 = 0.3$, б) $\sigma_1 = 0.8$, в) $\sigma_1 = 1$, г) $\sigma_1 = 1.5$.

На рис. 52 обратные стохастические бифуркации демонстрируются как качественные изменения формы графика функции плотности распределения. При фиксированном значении $\mu = 0.1$ стохастические бифуркации происходят в точках $\sigma_1 = \sqrt{0.1} \approx 0.316$ и $\sigma_1 = \sqrt{1.1} \approx 1.049$. При увеличении интенсивности мультипликативного шума от $\sigma_1 = 0.3$ (рис. 52 а) к $\sigma_1 = 0.8$ (рис. 52 б), форма графика функции $p(x, y)$ преобразуется из "кратер" в "кратер+пик". Увеличение σ_1 от $\sigma_1 = 0.8$ (рис. 52 б) к $\sigma_1 = 1.5$ (рис. 52 в) преобразует форму

графика из "кратер+пик" в "пик". Дальнейшее увеличение σ_1 приводит лишь к увеличению высоты пика (рис. 52 г). На интервале $0 < \sigma_1 < 1.5$ график функции $p(x, y)$ имеет три характерных формы: "кратер" (рис. 52 а)), "кратер-пик" (рис. 52 б), рис. 52 в)), "пик" (рис. 52 г)).

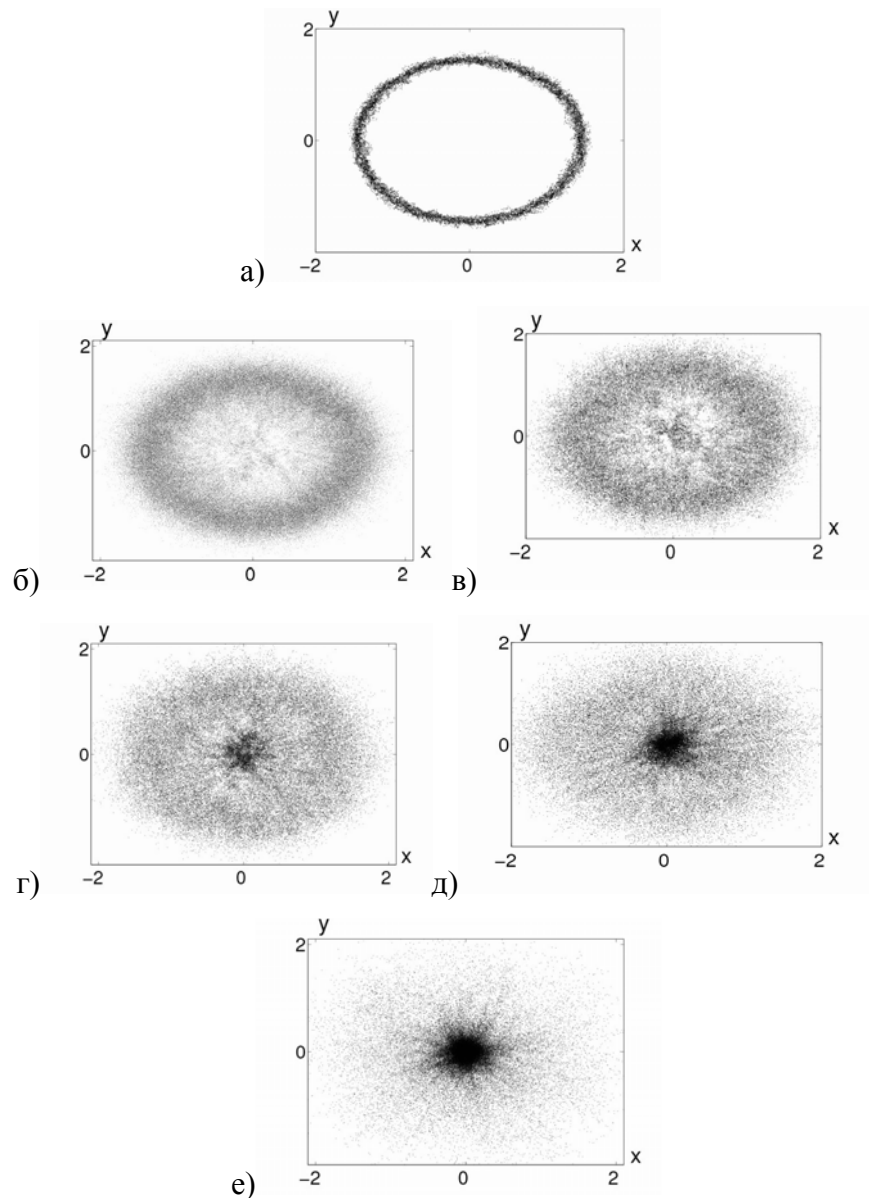


Рисунок 53 — Случайные состояния системы Хопфа при $\mu = 0.1$, $\sigma_2 = 0.2$ для а) $\sigma_1 = 0$, б) $\sigma_1 = 0.3$, в) $\sigma_1 = 0.7$, г) $\sigma_1 = 0.8$, д) $\sigma_1 = 1$, е) $\sigma_1 = 1.5$.

На рис. 53 представлены случайные состояния системы Хопфа для фиксированных значений параметров $\mu = 0.1$, $\sigma_2 = 0.2$, при различных значениях интенсивности σ_1 мультипликативного шума. Легко заметить, что при увеличении интенсивности σ_1

концентрация возмущенных траекторий перераспределяется от предельного цикла к точке покоя.

Таким образом, в случае мультистабильности, когда наблюдаются стохастические переходы между аттракторами, параметрический шум может изменить форму плотности распределения качественным образом. Такое качественное изменение графика плотности является характерным примером стохастической бифуркации.

6. Проведение патентных исследований по тематике проекта

По результатам проведенных патентных исследований на государственную регистрацию направлена разработанная программа для ЭВМ (справка о не патентоспособности РИД приведена в Приложении 2.). Копия свидетельства о государственной регистрации приведена в Приложении 3.

7. Исследование механизмов обратных стохастических бифуркаций

В данной части отчета представлены результаты исследования стохастически возмущенных циклов нелинейных дискретных динамических систем в зоне удвоения периода на основе метода функций стохастической чувствительности (ФСЧ). Техника ФСЧ была введена ранее для стохастических циклов нелинейных систем с непрерывным временем в [110-113] и для дискретных систем в [114]. Данная работа развивает подход к исследованию обратных стохастических бифуркаций, предложенный для непрерывных систем в работе [115] и для дискретных одномерных систем в [116].

В п. 1 приводится содержательное описание явления обратной стохастической бифуркации (ОСБ) и дается формальный критерий определения ОСБ по виду графика плотности вероятности распределения состояний стохастического цикла. Для построения плотности вероятности представлены два подхода – эмпирический подход и подход, опирающийся на аппарат функций стохастической чувствительности. Здесь дается общее описание ФСЧ для стохастических k -циклов многомерных систем. В п. 2 для стохастических циклов системы Эно плотность распределения вероятности случайных состояний определяется эмпирически в результате прямого компьютерного моделирования. Для аппроксимации плотности вероятности предлагается использовать аппарат функций стохастической чувствительности. Для стохастических циклов системы Эно дается оценка критических значений интенсивности возмущений, соответствующих обратным стохастическим бифуркациям.

1. Формализация явления ОСБ

Рассмотрим многомерную дискретную стохастическую систему

$$x_{t+1} = f(x_t) + \varepsilon \sigma(x_t) \xi_t, \quad (86)$$

где $f(x)$ - достаточно гладкая функция, $\sigma(x)$ - $n \times m$ -матрица, ξ_t - m -мерный некоррелированный случайный процесс с параметрами

$$E \xi_t = 0, E \xi_t \xi_t^T = I, E \xi_t \xi_k = 0 \quad (t \neq k),$$

где I - единичная $m \times m$ -матрица, ε - интенсивность шума.

Будем рассматривать случай, когда детерминированная система (86) (при $\varepsilon = 0$) имеет k -цикл - множество точек $\Gamma = \{\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_k\}$, связанных соотношениями:

$$f(\bar{x}_i) = \bar{x}_{i+1} \quad (i = 1, \dots, k-1), \quad f(\bar{x}_k) = \bar{x}_1.$$

Считаем, что последовательность \bar{x}_t определена при всех t с условием периодичности $\bar{x}_{t+k} = \bar{x}_t$. Предполагается, что цикл Γ является экспоненциально устойчивым.

Присутствие в системе (86) случайных возмущений приводит к тому, что фазовая траектория покидает детерминированный предельный цикл Γ и формирует вокруг его элементов множество случайных состояний. При малом значении интенсивности шума отклонения случайных состояний от Γ малы. Области рассеивания, соответствующие различным точкам детерминированного цикла, не пересекаются. С ростом ε величина отклонений растет и становится сравнима с расстоянием между соседними точками аттрактора. В результате соседние области рассеивания начинают пересекаться между собой. При дальнейшем увеличении ε после некоторого критического значения происходит полное слияние соседних областей.

Например, при малых шумах вокруг двух состояний детерминированного 2-цикла наблюдаются две непересекающиеся области рассеивания (**Ошибка! Источник ссылки не найден.**54, a, b). При увеличении шума эти области начнут пересекаться и при соответствующем уровне интенсивности возмущений сольются в одну -- стохастический 2-цикл перейдет в стохастическое равновесие (**Ошибка! Источник ссылки не найден.**54, $в$).

Такое качественное изменение фазового портрета системы - уменьшение кратности стохастического цикла при увеличении интенсивности шума - будем называть *обратной стохастической бифуркацией (ОСБ)*. После первой ОСБ при дальнейшем увеличении интенсивности шума для многократных стохастических циклов наблюдается серия *старших ОСБ* последовательного уменьшения кратности - вплоть до образования стохастического 1-цикла (равновесия).

Для детального анализа ОСБ в представляемой работе будем использовать функцию плотности вероятности случайных состояний. Данная функция позволяет описывать важные детали слияния соседних областей рассеивания при увеличении шума. Пусть в детерминированном случае ($\varepsilon = 0$) система (1) имеет устойчивый предельный 2-цикл Γ . Тогда при малом значении ε график плотности $p(x, \varepsilon)$ имеет два узких пика (**Ошибка! Источник ссылки не найден.**54, ε). При увеличении ε ширина пиков растёт, и начинается процесс их слияния (**Ошибка! Источник ссылки не найден.**54, δ). Форма графика при этом остается бимодальной, а общее количество точек локального максимума равно двум.

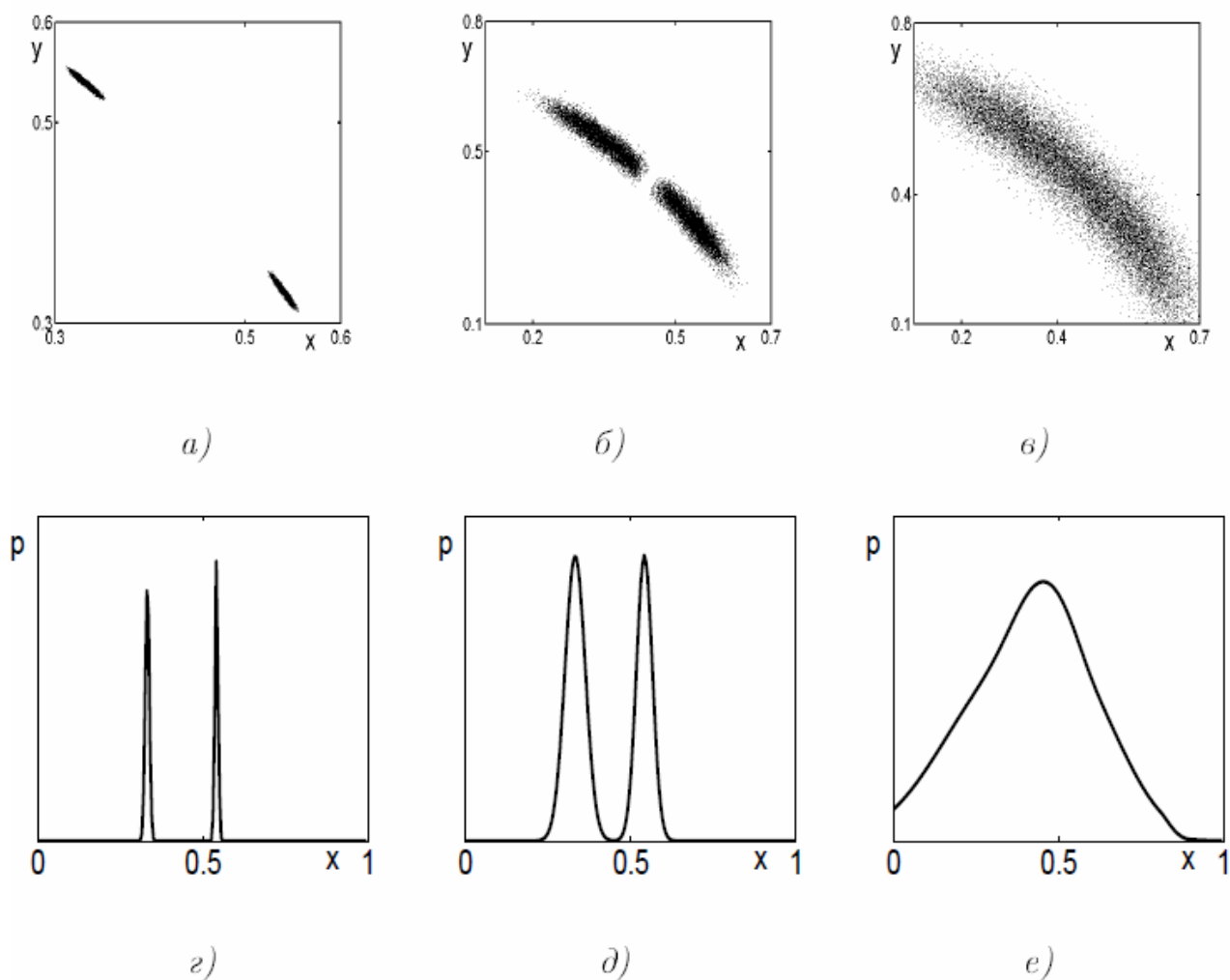


Рисунок 54 — Случайные состояния стохастической системы Эно при $\mu = 1.72$ для а) $\varepsilon = 0.001$, б) $\varepsilon = 0.005$, в) $\varepsilon = 0.03$ и проекции плотности вероятности для г) $\varepsilon = 0.001$, д) $\varepsilon = 0.005$, е) $\varepsilon = 0.03$.

При некотором значении ε происходит P -бифуркация [65] -- форма графика плотности качественно изменяется и становится унимодальной (Ошибка! Источник ссылки не найден.54, е). Соседние всплески сливаются в один, и остается только одна точка локального экстремума. При дальнейшем увеличении ε наблюдается один четко выраженный пик. Такое качественное изменение формы графика плотности - переход стохастического 2-цикла в 1-цикл - описывает ОСБ. Бифуркационное значение интенсивности шума, при котором происходит качественное изменение графика плотности $p(x, \varepsilon)$ от бимодальной формы к унимодальной, будем называть *критическим значением шума* и обозначать ε^* . В случае, когда в детерминированной системе (75) наблюдается устойчивый 2^k -цикл, критическим значением первой ОСБ будем называть значение

интенсивности шума, при которой график плотности $p(x, \varepsilon)$ переходит от 2^k -модальной формы к 2^{k-1} -модальной.

Таким образом, для анализа ОСБ необходимо знать плотности вероятности при различной интенсивности шума. Для построения плотности предлагается использовать два подхода: эмпирический и аналитический.

Эмпирический подход к изучению ОСБ опирается на численное моделирование случайной траектории процесса. В результате длительного итерационного процесса мы получаем статистический набор данных, по которому строится гистограмма. Для построения эмпирической статистики важным параметром является количество итераций. Значение данного параметра непосредственно влияет на затраты времени, расходуемого на численное моделирование. При малом количестве итераций, гистограмма, аппроксимирующая плотность вероятности, содержит значительную шумовую составляющую. Данный факт существенно осложняет применение какого-либо формального критерия, позволяющего по экстремумам судить о качественных изменениях формы графика, сопровождающего ОСБ. Сглаживание графика $p(x, \varepsilon)$ может быть достигнуто либо за счет значительного увеличения времени эмпирического моделирования либо за счет применения специальной процедуры сглаживания.

Предлагаемый в работе аналитический подход опирается на построение аппроксимации плотности вероятности с помощью аппарата функций стохастической чувствительности.

Аппарат функции стохастической чувствительности

Будем рассматривать случай, когда детерминированная система (86) при $\varepsilon = 0$ имеет k -цикл Γ . Рассмотрим решение x_t^ε стохастической системы (86) с начальным условием $x_1^\varepsilon = \bar{x}_1 + \varepsilon \xi$. При малых ε чувствительность детерминированного решения \bar{x}_t к случайным возмущениям определяется величиной

$$v_t = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{x_t^\varepsilon - \bar{x}_t}{\varepsilon}.$$

Для v_t справедлива система

$$v_{t+1} = F_t v_t + S_t \xi_t, \quad S_t = \sigma(\bar{x}_t), \quad (87)$$

где $F_t = \frac{\partial f}{\partial x}(\bar{x}_t)$. Стохастическая динамика последовательности v_t определяется изменением первых моментов $m_t = \mathbb{E}v_t, V_t = \mathbb{E}v_t v_t^T$. Для m_t и V_t справедливы следующие уравнения

$$m_{t+1} = F_t m_t, \quad (88)$$

$$V_{t+1} = F_t V_t F_t^T + Q_t, \quad Q_t = S_t S_t^T. \quad (89)$$

с начальными условиями $m_1 = \mathbb{E}\xi, V_1 = \mathbb{E}\xi\xi^T$. Благодаря k -периодичности коэффициентов F_t и Q_t из (88), (89) следует

$$m_{(l+1)k+1} = B m_{lk+1}, \quad (90)$$

$$V_{(l+1)k+1} = B V_{lk+1} B^T + Q, \quad (91)$$

где

$$B = F_k \cdot \dots \cdot F_2 F_1, \quad Q = Q_k + F_k Q_{k-1} F_k^T + \dots + F_k \cdot \dots \cdot F_2 Q_1 F_2^T \cdot \dots \cdot F_k^T.$$

В работе [114] показано, что в случае устойчивого k -цикла Γ детерминированной системы (86) последовательности m_t и V_t сходятся для любых начальных значений:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} m_t = 0, \quad \lim_{t \rightarrow \infty} (V_t - W_t) = 0. \quad (92)$$

Здесь W_t -- k -периодическая последовательность матриц ($W_{t+k} = W_t$), которая может быть найдена следующим образом. Матрица W_1 - единственное решение уравнения

$$W = B W B^T + Q, \quad (93)$$

а W_2, W_3, \dots, W_k находятся рекуррентно

$$W_{t+1} = F_t W_t F_t^T + Q_t, \quad t = 1, \dots, k-1. \quad (94)$$

Матричную k -периодическую функцию W_t , значения которой W_1, \dots, W_k характеризуют реакцию точек $\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_k$ цикла Γ системы (86) на малые случайные воздействия, будем называть *функцией стохастической чувствительности цикла*.

Используя функцию стохастической чувствительности в случае гауссовских шумов ξ_t , построим аппроксимацию плотности вероятности распределения случайных состояний стохастического k -цикла.

Случайные состояния x_t^ε нелинейной системы (86) при малых ε можно аппроксимировать суммой

$$x_t^\varepsilon \approx x_t + z_t, \quad (95)$$

где x_t, z_t -- решения системы стохастического линейного расширения

$$x_{t+1} = f(x_t), \quad x_t \in \Gamma \quad (96)$$

$$z_{t+1} = \frac{\partial f}{\partial x}(x_t)z_t + \varepsilon \sigma(x_t)\xi_t. \quad (97)$$

В силу линейности уравнения (97) и гауссовости шума ξ_t , решение z_t уравнения (97) также является гауссовским процессом.

При начальном условии $A_i = \{x_1 = \bar{x}_i\}$, связанном с произвольной фиксированной точкой \bar{x}_i устойчивого детерминированного цикла, компонента $z_{t,i}$ решения системы (96), (97) независимо от распределения начального состояния z_1 сходится к некоторому гауссовскому процессу $\bar{z}_{t,i}$. Этот установившийся процесс имеет нормальное распределение с нулевым математическим ожиданием $E\bar{z}_{t,i} = 0$ и периодической ковариационной матрицей, связанной с функцией стохастической чувствительности соотношением $cov(\bar{z}_{t,i}, \bar{z}_{t,i}) = \varepsilon^2 W_{t+i-1}$.

При условии A_i , для случайного состояния \bar{x}_t^ε стохастического цикла нелинейной системы (12) в силу (21) справедлива аппроксимация

$$\bar{x}_t^\varepsilon \approx \bar{x}_{t+i-1} + \bar{z}_{t,i},$$

где правая часть -- нормально распределенный вектор с математическим ожиданием \bar{x}_{t+i-1} и ковариационной матрицей $\varepsilon^2 W_{t+i-1}$. Соответствующая условная плотность распределения имеет вид

$$p(x/A_i) = \frac{1}{\varepsilon \sqrt{(2\pi)^n \det W_{t+i-1}}} \exp\left(-\frac{1}{2\varepsilon^2} (x - \bar{x}_{t+i-1})^T W_{t+i-1}^{-1} (x - \bar{x}_{t+i-1})\right).$$

Считая события A_i равновероятными ($p(A_i) = \frac{1}{k}$), по формуле полной вероятности имеем

$p(x) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k p(x/A_i)$. В силу k -периодичности функции стохастической чувствительности W_i и \bar{x}_i , получаем окончательную формулу

$$p(x) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \frac{1}{\varepsilon \sqrt{(2\pi)^n \det W_i}} \exp\left(-\frac{1}{2\varepsilon^2} (x - \bar{x}_i)^T W_i^{-1} (x - \bar{x}_i)\right). \quad (98)$$

Как видим, функция $p(x)$ однозначно определяется состояниями \bar{x}_i цикла невозмущенной детерминированной системы и набором матриц W_i - значений функции стохастической чувствительности. Конструктивный алгоритм расчета функции стохастической чувствительности представлен в (93), (94).

2. Анализ ОСБ циклов системы Эно

Рассмотрим стохастическую систему Эно

$$\begin{aligned} x_{t+1} &= 1 - \mu x_t^2 - 0.5 y_t + \varepsilon \xi_{1,t} \\ y_{t+1} &= x_t + \varepsilon \xi_{2,t} \end{aligned} \quad (99)$$

где $\xi_{1,t}, \xi_{2,t}$ последовательности независимых гауссовых случайных величин, $E \xi_{1,t} = E \xi_{2,t} = 0$; $E \xi_{1,t}^2 = E \xi_{2,t}^2 = 1$; $E \xi_{1,t} \xi_{2,t} = 0$, а ε -- интенсивность шумов.

При отсутствии случайных возмущений ($\varepsilon = 0$) детерминированная модель Эно (99) имеет на интервале $1.6 \leq \mu \leq 2.5$ различные типы динамики с чередующимися зонами

порядка и хаоса. На интервале, где наблюдаются бифуркации удвоения периода, можно выделить зоны структурной устойчивости - интервалы I_0, I_1, \dots - с постоянной кратностью циклов, разделенные точками бифуркаций. На интервале I_n наблюдаются 2^n -циклы. Для детерминированной системы (99) имеем следующие интервалы структурной устойчивости: $I_0 \approx (1.6, 1.68)$, $I_1 \approx (1.68, 2.31)$, $I_2 \approx (2.31, 2.41)$ и т.д. При этом на I_0 имеем одну точку покоя $\bar{x}_{0,1}(\mu) = \bar{y}_{0,1}(\mu) = \frac{\sqrt{9+16\mu}-3}{4\mu}$, на I_1 имеем 2-цикл с состояниями

$$\bar{x}_{1,1}(\mu) = \frac{3 + \sqrt{16\mu - 27}}{4\mu}, \quad \bar{y}_{1,1}(\mu) = \frac{3 - \sqrt{16\mu - 27}}{4\mu};$$

$$\bar{x}_{1,2}(\mu) = \bar{y}_{1,1}(\mu), \quad \bar{y}_{1,2}(\mu) = \bar{x}_{1,1}(\mu).$$

Для 2-цикла системы Эно ($\mu = 1.72$) изменение эмпирической плотности вероятности, полученной прямым численным моделированием, в зависимости от интенсивности добавленного возмущения представлено на рис. 55 (серый цвет). Переход от бимодальной к унимодальной форме графика плотности происходит при $\varepsilon^* \approx 0.018$. В связи с большими затратами времени на численное моделирование цикла и сглаживание графика эмпирической плотности вероятности получена только грубая оценка критического значения.

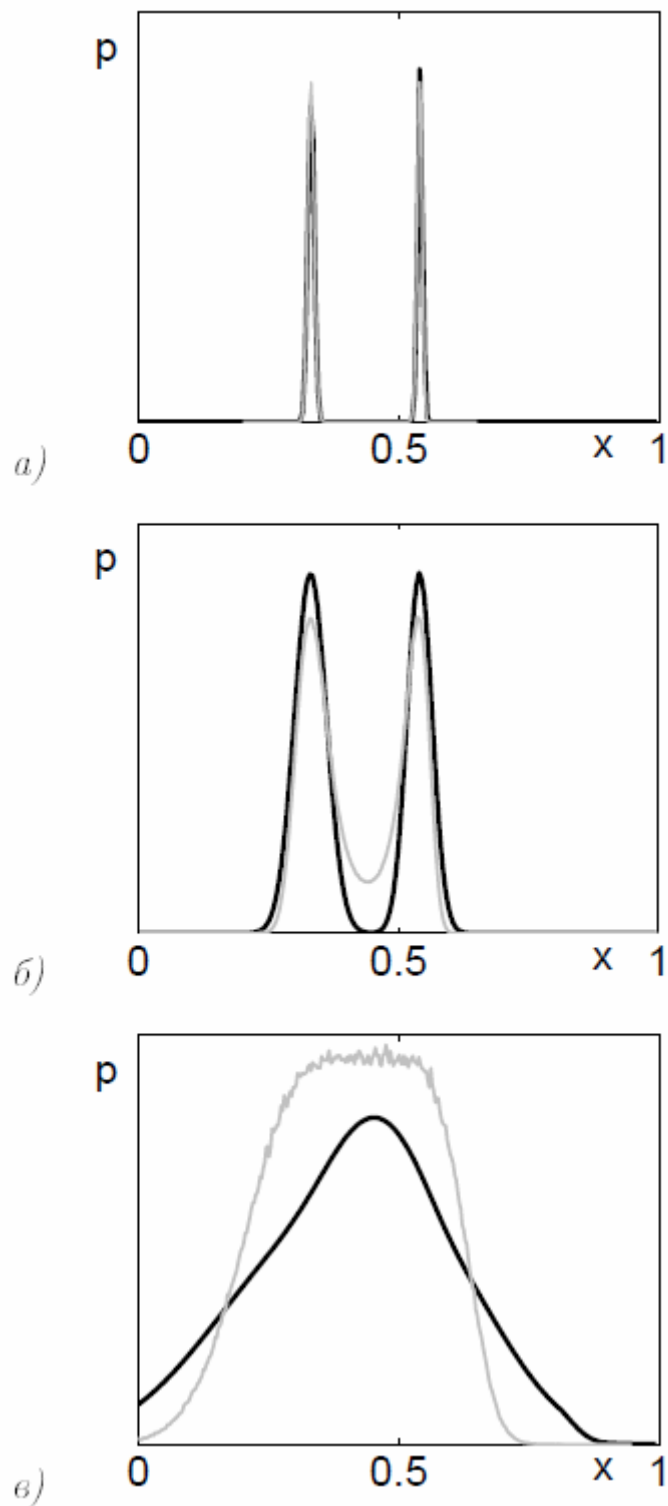


Рисунок 55 — Проекции плотности вероятности циклов системы Эно: эмпирическое построение (серый цвет), теоретическая аппроксимация (черный цвет) для $\mu = 1.72$ а) при $\varepsilon = 0.001$, б) при $\varepsilon = 0.01$, в) при $\varepsilon = 0.03$.

Перейдем к теоретическому анализу ОСБ, позволяющему избежать больших затрат времени, связанных с численным моделированием. Для 2-цикла ($\mu = 1.72$) на **Ошибка!** **Источник ссылки не найден.**55 приведены графики плотности p , полученные из

теоретической аппроксимации (98) с использованием ФСЧ. Как видно из рис. 55, теоретическая аппроксимация плотности вероятности (черный цвет) хорошо соответствует эмпирическим данным. При изменении значений ε в интервале $(0.001; 0.03)$ количество локальных максимумов изменяется, и график плотности преобразуется соответственно от бимодальной к унимодальной форме. Таким образом, критическое значение первой ОСБ перехода 2-цикла в 1-цикл принадлежит интервалу $(0.001; 0.03)$. Более точно $\varepsilon^* = 0.0176$. Для определения модальности графика теоретической аппроксимации плотности вероятности использовался следующий алгоритм: из каждой точки детерминированного аттрактора по методу "наискорейшего спуска" находились ближайшие локальные максимумы и далее по количеству различных локальных максимумов определялась модальность графика.

Для 4-цикла ($\mu = 2.32$) с помощью аппроксимации (98) получена оценка критического значения интенсивности шума $\varepsilon^* = 0.0026$. Переход от четырехмодальной формы плотности к бимодальной для данного значения параметра представлен на рис. 56.

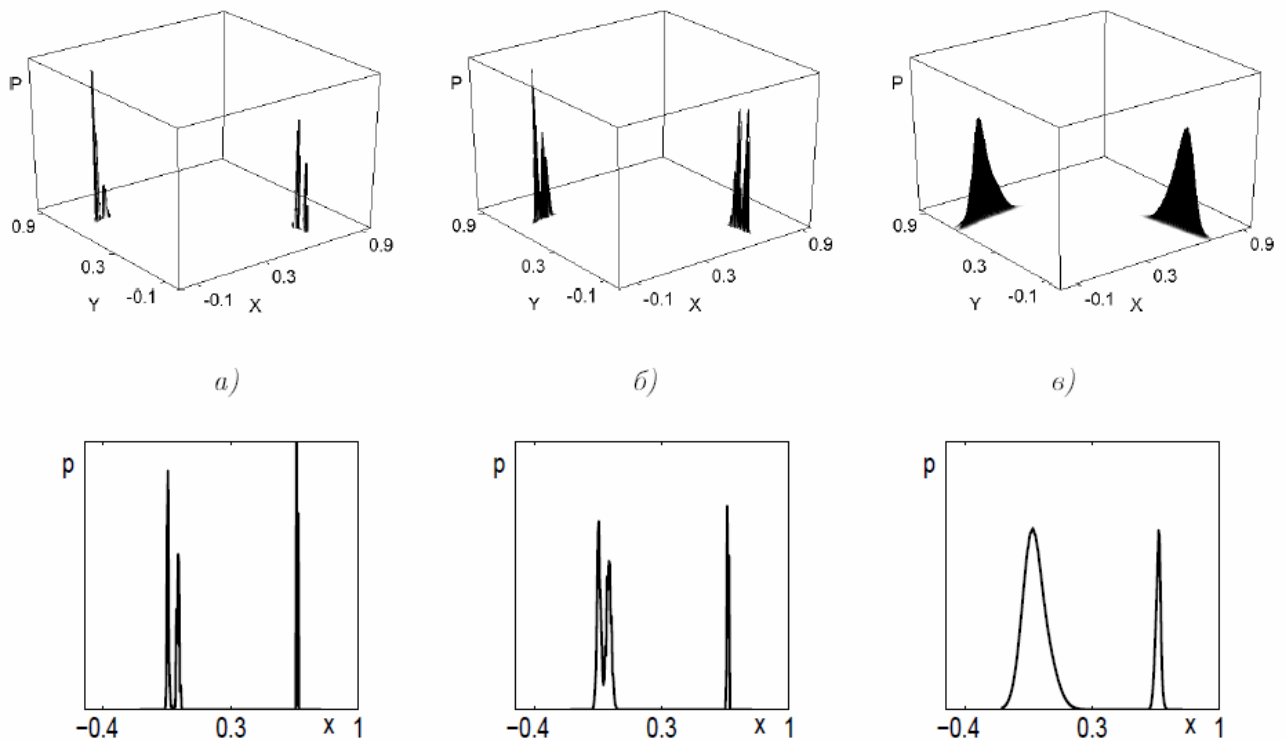


Рисунок 56 — Теоретическая плотность вероятности циклов системы Эно для $\mu = 2.32$, а) при $\varepsilon = 0.0005$, б) при $\varepsilon = 0.001$, в) при $\varepsilon = 0.005$.

Величина ε^* критическое значение интенсивности шума, отвечающая первой ОСБ перехода от 2-цикла к 1-циклу, зависит от параметра μ . Графики функции $\varepsilon^*(\mu)$, полученные эмпирическим моделированием (серый цвет) и найденные с помощью ФСЧ (черный цвет) представлены на рис. 57. Как видим метод, основанный на аппроксимации (98) с использованием ФСЧ, позволяет достаточно точно найти бифуркационные значения, отвечающие первой ОСБ.

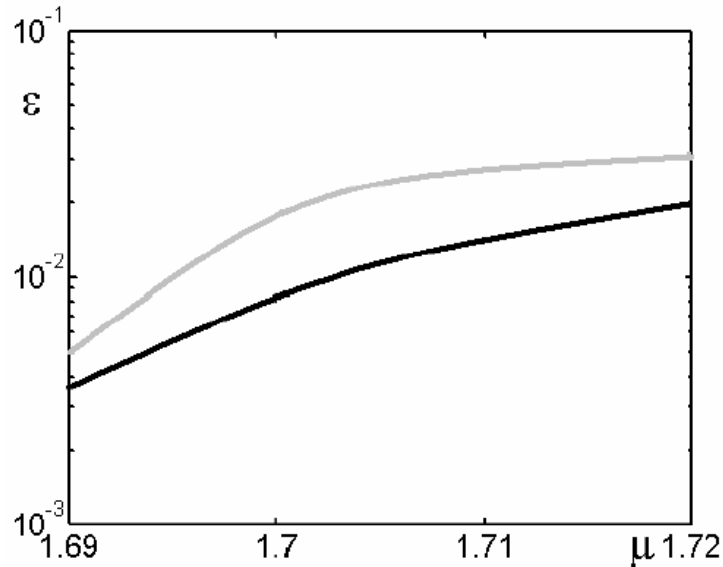


Рисунок 57 — Диаграмма первой ОСБ системы Эно: эмпирическая оценка (серый цвет), теоретическая оценка (черный цвет).

Проследим изменение бифуркационного значения интенсивности при смене интервалов структурной устойчивости. На рис. 58 представлен график поведения критического значения интенсивности шума первой ОСБ $\varepsilon^*(\mu)$ на интервалах $I_1 \cup I_2$

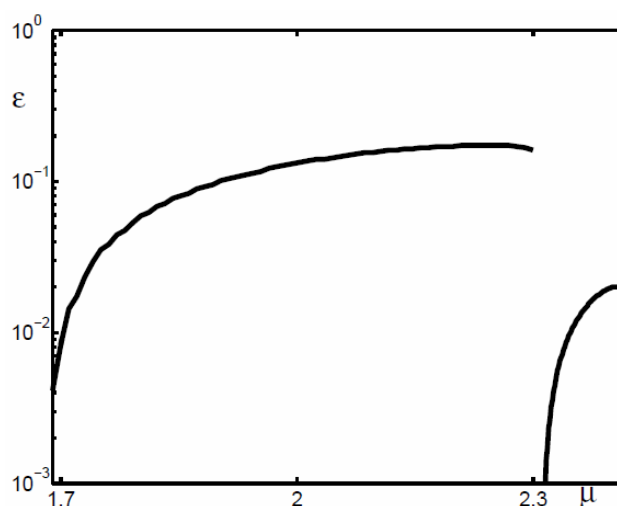


Рисунок 58 — Диаграмма теоретической оценки первой ОСБ системы Эно.

Как видно из данного рисунка, график $\varepsilon^*(\mu)$ демонстрирует самоподобие на интервалах I_k . На каждом из этих интервалов функция $\varepsilon^*(\mu)$ сначала возрастает, а затем стабилизируется.

8. Внедрение результатов НИР в образовательный процесс

Разработаны программы внедрения результатов НИР в образовательный процесс в качестве заданий аспирантам, магистрантам и студентам математико-механического факультета УрФУ, а также лекционных и практических занятий в основных курсах «Гидродинамика», «Аналитические методы механики сплошных сред», «Стохастическая динамика», «Нелинейная динамика: от порядка к хаосу», в специальных курсах «Тепломассоперенос», «Статистическая механика жидкости», «Континуальные модели процессов переноса в биофизике» и в учебном практикуме «Нелинейная динамика», читаемых студентам математико-механического факультета УрФУ. Результаты, полученные при выполнении проекта, используются на семинаре «Учебно-научный семинар», участниками которого являются студенты старших курсов математико-механического факультета УрФУ направления «Математическое моделирование». Результаты проведенной НИР внедрены в учебный процесс посредством учебного пособия: Вшивков С.А., **Зубарев А.Ю.**, Сафронов А.П. «Самоорганизация, фазовые переходы и свойства анизотропных сред в магнитном и механическом полях» // Монография. Уральский федеральный университет. Екатеринбург, 2011.

Заключение

По проделанной работе на шестом этапе можно сформулировать следующие результаты (согласно Техническому заданию и Календарному плану).

В работе проведен анализ морфологической неустойчивости процесса кристаллизации с анизотропной и неоднородной областью фазового перехода при учете течений в жидкой фазе и конвективного переноса тепла и массы в двухфазной зоне. Теоретически рассмотрен механизм нарушения устойчивости процесса затвердевания, который заключается в конвективном тепломассопереносе и течениях жидкости по каналам области фазового перехода. Проведен линейный анализ морфологической устойчивости с учетом возмущений скорости течения жидкости, диффузии примеси в двухфазной зоне и зависимости коэффициентов переноса от фазового состава. Найден декремент возмущений для анизотропной и неоднородной структуры двухфазной зоны, определены кривые нейтральной устойчивости процесса кристаллизации. Показано, что учет диффузии примеси и увеличение неоднородности зоны фазового перехода расширяют область неустойчивости, а уменьшение анизотропии приводит к ее сужению. Определен новый критерий конвективно-морфологической неустойчивости процесса кристаллизации с протяженной областью фазового превращения, который существенно расширяет область неустойчивости при увеличении скорости течения жидкости.

Впервые проведен слабонелинейный анализ на морфологическую устойчивость кругового кристалла в произвольном режиме роста, и найдено поле концентрации, скорость роста и радиус потери устойчивости кристалла в третьем порядке теории возмущений. Найдено, что с увеличением номера возмущающей гармоники линейный критический радиус при любом режиме роста возрастает, а квадратичная поправка к нему убывает. Обнаружено, что увеличение амплитуды возмущения для $k > 2$ приводит к уменьшению радиуса устойчивости кристалла, что может говорить о возможности сосуществовании морфологических фаз. Получена немонотонная зависимость квадратичной поправки g_1 к линейному радиусу устойчивости от режима роста: в диффузионном режиме ($\alpha < 1$) g_1 убывает, а в кинетическом ($\alpha > 100$) – возрастает.

Исследования, проведенные на отчетном этапе, показали, что реологические свойства магнитных суспензий очень чувствительны к фракционному составу частиц, из которых состоят эти системы. Так, в традиционных полидисперсных феррожидкостях, присутствие относительно мелких частиц, не способных объединяться в цепочечные и иные гетероагрегаты, существенно влияет на размеры этих агрегатов, образованных наиболее

крупными частицами, и поэтому влияет на макроскопические свойства феррожидкости. Самые мелкие частицы, с диаметром несколько нанометров, за счет стерических эффектов увеличивают характерную длину цепочек и, как следствие – магнитовязкий эффект и время вязкоупругой релаксации. При отсутствии частиц с диаметром около 10 нм приводит к обратному эффекту. Поэтому реология феррожидкостей чувствительна не только к присутствию наиболее крупных частиц, но и к фракционному составу мелких.

Объединение однодоменных ферромагнитных частиц в кластерные агрегаты, за счет их скрепления полимерной шубой, приводит к существенному увеличению реологических свойств системы и времени ее вязкоупругого отклика. В то же время, композиционные феррожидкости седиментационно устойчивы. Это открывает новые возможности практического использования магнитных жидкостей в современных высокотехнологических приложениях.

Проведено исследование магнитной жидкости с интенсивным межчастичным диполь-дипольным взаимодействием. Показано, что устойчивые цепочки образуются в системах с параметром диполь-дипольного взаимодействия больше 2. Построена модель феррожидкости с цепочечными агрегатами. При помощи аналитической модели изучено влияние напряженности внешнего магнитного поля на параметры цепочечных агрегатов в феррожидкостях.

Разработана теоретическая модель для вычисления структурного фактора феррожидкости с сильным межчастичным диполь-дипольным взаимодействием, в которой образуются цепочки, для случаев моно- и бидисперсной систем, в отсутствие внешнего магнитного поля. Разработанный метод основывается на явном построении парной функции распределения, в ситуации, когда известно равновесное распределение цепочек, полученное путем минимизации функционала плотности свободной энергии системы. Для определения топологии кластеров использовалась область малых волновых векторов q . В области $q < \pi$ структурный фактор имеет степенное поведение $S(q) \sim q^{-D}$, причем степенной показатель D является фрактальной размерностью кластеров внутри образца [29]. Значения D , близкие к единице, означают, что в системе образуются линейные одномерные цепочки. Показано, что степенной показатель D достигает единицы только в отсутствие мелких частиц, и сильно уменьшается с ростом концентрации мелких частиц. Эти результаты указывают на потребность в отдельном описании полидисперсности, когда речь идет о реальных феррожидкостях. Показано, что, даже если цепочечные агрегаты есть в феррожидкости, показатель в степенном законе может быть $D < 1$. Поэтому только по аномальному поведению структурного фактора при малых волновых векторах q невозможно сделать

точные выводы о микроструктуре, что подтверждает необходимость разработанного нами комплексного подхода.

Определена парная функция распределения концентрированной магнитной жидкости со слабым и умеренным межчастичным магнито-дипольным взаимодействием, в которой не могут образовываться цепочки. Рассмотрено групповое разложение, представляющее парную функцию распределения в виде ряда по степеням объемной концентрации φ и параметра диполь-дипольного взаимодействия λ . Приведены точные выражения для парной функции распределения в рамках ограничения двух- и трехчастичными диаграммами с точностью до φ и λ^4 . Данное ограничение описывает межчастичные корреляции в концентрированных феррожидкостях с умеренной интенсивностью межчастичных диполь-дипольных взаимодействий ($\lambda < 2$).

В отсутствие магнитного поля парная функция распределения демонстрирует первый пик и слабо выраженный второй максимум, соответствующие первой и второй координационным сферам. Показано, что нецентральное диполь-дипольное взаимодействие в коллективе феррочастиц проявляется неоднозначным образом: вклады четных степеней: λ^2, λ^4 свидетельствуют о коллективном межчастичном притяжении, в то время как вклады: λ^3 демонстрируют эффективное межчастичное отталкивание.

Анизотропная часть парной функции в магнитном поле рассчитана в низшем порядке теории возмущений по λ в ограничении вторым полиномом Лежандра по углу относительно направления магнитного поля. Показано, что анизотропия межчастичных магнито-дипольных корреляций в магнитном поле проявляется даже для слабо концентрированных и слабо неидеальных феррожидкостей. Анализ анизотропной парной функции распределения системы феррочастиц в магнитном поле продемонстрировал явную тенденцию к формированию димеров феррочастиц вдоль направления поля. В то же время в перпендикулярном полю направлении полностью пропадает первый пик в парной функции распределения, что соответствует преобладанию межчастичного отталкивания.

Рассчитанная парная функция распределения использована для изучения структурного фактора и его анизотропии в магнитном поле. Увеличение интенсивности магнито-дипольного взаимодействия приводит к незначительному росту первого пика структурного фактора и его смещению в область больших значений волнового вектора. Причиной смещения является формирование первой координационной сферы в парной функции распределения и установлению ближнего порядка, характерного для жидкостей.

Обнаружено, что наличие внешнего магнитного поля приводит к сильной анизотропии структурного фактора даже для слабо концентрированных феррожидкостей с

невысокой интенсивностью межчастичного диполь-дипольного взаимодействия. Усиление магнитного поля приводит к сильному росту первого максимума структурного фактора в продольном вдоль поля направлении и ослаблению всех экстремумов структурного фактора в перпендикулярном направлении. Последняя тенденция свидетельствует о том, что в перпендикулярном полю направлению притягивающие и отталкивающие межчастичные корреляции взаимно компенсируют друг друга. Поэтому структурный фактор характеризуется поведением, близким для идеального газа невзаимодействующих частиц.

Таким образом, в результате выполнения проекта были исследованы структурные свойства магнитных жидкостей в большом диапазоне концентраций и для всех возможных значений интенсивности межчастичного диполь-дипольного взаимодействия.

Был разработан метод вычисления третьего вириального коэффициента – посредством постановки компьютерного эксперимента. Были проведены две серии компьютерных экспериментов. В рамках этих экспериментов получены данные, которые позволили определить значения второго и третьего вириальных коэффициентов для жидкости Леннарда-Джонса. Исследовано поведение данных коэффициентов в зависимости от температуры. Произведен сравнительный анализ второго вириального коэффициента для случая монослоя и объема и для третьего вириального коэффициента соответственно. Из анализа поведения третьего вириального коэффициента жидкости Леннарда-Джонса, был сделан вывод о том, что его поведение в монослое отличается от случая объема не только количественно, но и качественно. Таким образом, показано, что вкладом трехчастичных взаимодействий в уравнение состояния системы для жидкости Леннарда-Джонса и для системы, описывающей поведение магнитной жидкости в монослое, пренебрегать нельзя.

Предложенный метод использовался для вычисления третьего вириального коэффициента для магнитной жидкости в монослое, взаимодействие частиц в которой описывают два потенциала: межчастичное притяжение описывает потенциал диполь-дипольного взаимодействия, а отталкивание между частицами определяется потенциалом мягких сфер.

В ходе выполнения проекта был разработан метод, позволяющий исследовать структуру основного состояния тонкого слоя магнитной жидкости. Были найдены точные формулы для расчета энергии цепочки, идеального кольца, вложенных колец и двух колец рядом. Основной вывод: идеальное кольцо из всех частиц системы имеет наименьшую энергию - является основным состоянием. Данный результат справедлив в отсутствии пространственных ограничений и внешнего магнитного поля.

Вычислен функционал свободной энергии концентрированной монодисперсной магнитной жидкости методом диаграммного (вириального) разложения. Приведены точные

выражения для вклада диполь-дипольного взаимодействия в свободную энергию системы дипольных твердых сфер с точностью до φ^2 и λ^3 . На основе полученного аналитического выражения для свободной энергии магнитной жидкости исследованы термодинамические свойства стерически и ионно стабилизированных магнитных жидкостей: осмотическое давление, теплоемкость, изотермическая сжимаемость и теплоемкости при постоянном объеме. Теоретические результаты хорошо согласуются с данными компьютерного моделирования и могут быть применимы для описания термодинамических и структурных свойств в концентрированных феррожидкостях с невысокой интенсивностью межчастичных магнито-дипольных взаимодействий ($\lambda < 2$).

Также, на основе полученного в ходе выполнения проекта аналитического выражения для свободной энергии изучена анизотропия диффузионных процессов в магнитных жидкостях в магнитном поле. Выведено динамическое уравнение диффузии для концентрированной магнитной жидкости, описывающее магнитофорез, седиментацию коллоидных частиц и диффузионные процессы с учетом стерических, магнитодипольных и гидродинамических взаимодействий между частицами. Коэффициент диффузии коллоидных частиц записан с учетом стерических и магнитодипольных межчастичных взаимодействий. Стерические взаимодействия учитываются в рамках аппроксимации Карнагана-Старлинга для системы твердых сфер. Для учета эффективного притяжения частиц, обусловленного магнитодипольными межчастичными взаимодействиями, свободная энергия системы твердых сфер представлена в виде вириального разложения с точностью до членов, квадратичных по концентрации частиц. Вириальное разложение использовано для получения интерполяционной формулы, хорошо согласующейся с данными численного моделирования в широком диапазоне концентраций частиц и энергии межчастичных взаимодействий. Этим самым заложена основа для постановки краевых задач и расчета концентрационных и магнитных полей в устройствах, использующих магнитную жидкость в качестве рабочей. Аналитически исследовано расслоение магнитной жидкости, возникающее под действием гравитационного поля в круглом цилиндре конечной высоты. Коэффициент разделения раствора по концентрации частиц рассчитан в зависимости от средней концентрации и параметра магнитодипольных взаимодействий. Показано, что эти взаимодействия многократно усиливают неоднородность жидкости по концентрации, если средняя объемная доля частиц не превышает 30%. При больших концентрациях их влияние на распределение частиц в цилиндре быстро убывает и становится пренебрежимо малым. Главную роль играют стерические взаимодействия.

На основе модели магнитной жидкости как системы дипольных твердых сфер определяются магнитостатические свойства феррожидкости, такие как намагниченность и

начальная магнитная восприимчивость. Для описания свойств концентрированных систем особое внимание уделяется исследованию многочастичных корреляций в ориентациях магнитных моментов и расположениях феррочастиц.

Разработанные на предыдущих этапах методы исследования магнитных жидкостей, а также полученные аналитические выражения для свободной энергии и парной функции распределения позволили определить магнитостатические свойства концентрированной магнитной жидкости: намагниченность и начальную магнитную восприимчивость. На заключительном этапе настоящего проекта проводилось сравнение теоретических результатов по магнитостатическим свойствам системы с данными компьютерного моделирования и физических экспериментов. Получено хорошее согласие данных в большом диапазоне концентраций феррочастиц, что доказывает жизнеспособность построенной теории и возможность ее применения для предсказания и прогнозирования свойств концентрированных магнитных жидкостей.

На последнем шестом этапе проекта было завершено построение теории и методики анализа обратных стохастических бифуркаций для общего многомерного случая. Конструктивные возможности разработанного подхода детально продемонстрированы на примере классической дискретной двумерной системы Эно. В случае одно- и двумерных систем, когда удается аналитически построить функцию стационарной плотности распределения случайных состояний аттракторов, в окончательной виде представлены результаты исследования возможных сдвигов и качественных преобразований форм стохастических аттракторов. Для индуцированных шумом сдвигов максимумов плотности распределения выведено разложение по параметру интенсивности шума, исследована погрешность возможных оценок. Проведен сравнительный анализ воздействия на систему аддитивных и параметрических шумов. Показано, что аддитивный шум не меняет расположения экстремумов плотности распределения, а параметрический может привести к качественным изменениям формы плотности, порождая индуцированные шумами переходы между аттракторами типа: равновесие – равновесие, цикл – цикл+равновесие – равновесие.

Подводя итоги работ за весь отчетный период 2009-2011 года, можно выделить два направления. Первое направление связано с построением математической теории стохастической устойчивости общих многообразий нелинейных динамических систем. Главным результатом здесь является общий вариант метода функций Ляпунова для анализа экспоненциальной среднеквадратичной устойчивости компактных инвариантных многообразий нелинейных стохастических дифференциальных уравнений. С использованием конструкции системы стохастического линейного расширения и понятия P -

устойчивости доказана теорема о стохастической устойчивости по первому приближению и получен общий критерий, сводящий исследование стохастической устойчивости к оценкам спектрального радиуса некоторого положительного оператора. Данная теоретическая разработка дала возможность вывести новые конструктивные параметрические критерии стохастической устойчивости как для точки покоя, так и для основных колебательных режимов - предельного цикла и тороидального инвариантного многообразия. Для проверки этих критериев разработаны эффективные итерационные численные алгоритмы и доказана их сходимость. Для реализации построенных алгоритмов, разработаны необходимые программные средства, конструктивные возможности которых продемонстрированы на решении ряда практических примеров.

В ходе исследований по второму направлению разработана математическая теория функции стохастической чувствительности общих инвариантных многообразий. Данная функция в достаточно сжатой и конструктивной форме позволяет описать основные пространственные вероятностные характеристики пучка случайных траекторий системы, локализованного в окрестности исследуемого инвариантного множества. Разработаны эффективные численные алгоритмы, позволяющие находить данную функцию для сложных пространственных стохастических аттракторов как в непрерывном, так и в дискретном случае, в том числе и в зонах перехода от порядка к хаосу. Данная теоретическая разработка позволила решить весь спектр задач, поставленных в проекте, связанных с анализом стохастических аттракторов и их бифуркаций. Построен метод доверительных областей (эллипсов и торов), с помощью которого в наглядной геометрической форме удастся представить пространственные особенности вероятностных распределений стохастических аттракторов. В ходе работы над проектом проведен анализ модели течения сложной жидкости, выявлен вероятностный механизм недавно обнаруженных новых явлений возбуждения индуцированных шумом осцилляций. Разработанная в рамках проекта методика позволила успешно провести детальное исследование стохастических предельных циклов в зоне удвоения периода для моделей Лоренца и Ферхюльста. Среди полученных результатов стоит выделить обнаруженную универсальную закономерность в динамике стохастической чувствительности предельных циклов в цепи бифуркаций удвоения периода в зоне перехода от порядка к хаосу.

Методом функции стохастической чувствительности исследован вероятностный механизм индуцированных шумом переходов между сосуществующими предельными циклами системы Лоренца. Разработан подход, позволяющий методом функции стохастической чувствительности исследовать индуцированные шумом переходы между

соседними точками аттракторов модели Ферхюльста, приводящие к снижению кратности стохастических циклов и порождать обратные стохастические бифуркации.

Все поставленные в проекте задачи успешно решены, разработанные общие математические конструкции и их приложения к решению актуальных исследовательских задач опубликованы в центральных российских и зарубежных журналах. В ходе работы над проектом выявлены новые перспективные направления исследований и актуальные научные задачи, получены предварительные результаты по возможным методам их решения.

Список опубликованных работ

(жирным шрифтом выделены исполнители работ по настоящей теме)

Статьи в российских журналах

1. **Александров Д.В.**, Асеев Д.Л., **Малыгин А.П.**, К теории процессов затвердевания с неравновесной двухфазной зоной // Расплавы, 2011, N 1, С. 16-30.
2. **Башкирцева И.А.**, **Ряшко Л.Б.**, Федотов С.П., **Цветков И.Н.**, Обратные стохастические бифуркации в системе Эно // Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика, 2011.- Т.19. №2. - С. 31-42.

Статьи в зарубежных журналах

1. Bossis G., Lopez-Lopez M., **Zubarev A.**, Microdynamics of magnetic particles dispersed in complex media, International Journal of Modern Physics B, 2011, Vol. 25, P. 905-910.
2. **Ryashko L.**, **Bashkirtseva I.**, Analysis of excitability for the FitzHugh-Nagumo model via a stochastic sensitivity function technique // Phys. Rev. E, 2011, Vol. 83, P. 061109-061117.
3. Pshenichnikov A.F., **Elfimova E.A.**, **Ivanov A.O.**, Magnetophoresis, sedimentation and diffusion of particles in concentrated magnetic fluids // J. Chem. Phys, 2011, Vol. 134, N18, P. 184508-1-9.
4. **Ivanov A.O.**, **Kuznetsova O.B.**, Subbotin I.M., Magnetic properties of ferrofluid emulsions: model of non-interacting droplets // Magnetohydrodynamics, 2011, Vol. 47, N 2, P. 3-8.

Список работ, направленных в печать

1. **Крутикова Е.В., Елфимова Е.А.**, Структурный фактор рассеяния полидисперсных магнитных жидкостей // Письма в ЭЧАЯ, 2011 (представлена к печати).
2. Laura Rodríguez-Arco, Modesto T. López-López, Juan D.G. Durán, **Andrey Zubarev, Dmitriy Chirikov**, Stability and magnetorheological behavior of magnetic fluids based on ionic liquids, J/Physics: Condensed Matters, (представлена к печати).
3. **Ryashko L., Bashkirtseva I.**, Sensitivity analysis of stochastic attractors and noise-induced transitions for population model with an Allee effect // CHAOS, 2011 (представлена к печати).
4. **Прокопьева Т.А., Данилов В.А., Канторович С.С.**, Микроструктура основного состояния тонкого слоя магнитной жидкости // ЖЭТФ, 2011 (принята в печать).
5. **Пьянзина Е.С., Канторович С.С.**, Структурный фактор феррожидкостей с цепочечными агрегатами: влияние внешнего магнитного поля // Письма в ЭЧАЯ, 2011 (представлена к печати).

Доклады и тезисы на всероссийских конференциях и семинарах

1. **Иванов А.О., Кузнецова О.Б., Субботин И.М.**, Магнитожидкостные эмульсии: модель невзаимодействующих капель // Тез. докл. XVII Зимней школы по механике сплошных сред, ИМСС УрО РАН, Пермь, февраль-март 2011, С. 137.
2. **Крутикова Е.В., Елфимова Е.А.**, Исследование структурных свойств бидисперсной магнитной жидкости // XLV Зимняя Школа ПИЯФ РАН, Гатчина Секция Физики Конденсированного состояния, ФКС-2011, С. 112.

Доклады и тезисы на международных конференциях и семинарах

1. **Chirikov D., Zubarev A.**, Viscoelastic properties of ferrofluids, 7th Annual European Rheology Conference. Суздаль, 2011.
2. **Elfimova E., Efimova V., Ivanov A.** Determination of the most probable magnetic moment orientations of a pair of dipolar hard spheres // Abstr. Moscow International Symposium on Magnetism, Москва, МГУ, август 2011.
3. **Elfimova E., Ivanov A.**, Magnetostatic properties of dense ferrocolloids // Proceedings of «8 Liquid Matter Conference» (accepted in print). Австрия, Вена, 6-10 сентября 2011.

4. **Elfimova E., Ivanov A.** Influence of interparticle correlations on the thermodynamic properties of concentrated ferrocolloids // Proceedings of «8 Liquid Matter Conference» (accepted in print). Австрия, Вена 6-10 сентября 2011.
5. **Elfimova E., Ivanov A., Turysheva E.**, The influence of interparticle correlations on initial magnetic susceptibility of a ferrofluid // Abstr. Moscow International Symposium on Magnetism, Москва, МГУ, август 2011.
6. **Elfimova E., Korolev V., Korolev D., Titova E.**, Heat capacity of a magnetic fluid: theory and experiment // Abstr. Moscow International Symposium on Magnetism, Москва, МГУ, август 2011.
7. **Ivanov A.O., Kuznetsova O.B., Subbotin I.M.**, Magnetic properties of ferrofluid emulsions: Model of non-interacting droplets // Abstr. Euromech Colloquim 526 «Petterns in Soft Magnetic Matter», Dresden, March 2011, P. 21-22.
8. **Ivanov A.O., Kuznetsova O.B., Subbotin I.M., Dikanskii Yu.I.**, Magnetic properties of ferrofluid emulsions // Abstr. Moscow International Symposium on Magnetism, Москва, МГУ, август 2011.
9. **Lakhtina E., Elfimova E., Epifanov Yu.**, Spatial ferroparticle distribution in a magnetic fluid under strong gravitational field // Abstr. Moscow International Symposium on Magnetism, Москва, МГУ, август 2011.
10. **Minina E., Dobroserdova A., Cerda J., Kantorovich S., Holm C.**, Bidisperse monolayers: what changes in 2D. // DPG Spring Meeting 2011, Технический университет г. Дрезден, Дрезден, Германия, 2011, CPP 38.35.
11. **Perevalova T., Ryashko L.**, Stochastic attractors and bifurcations in nonlinear dynamic systems // Thesis of conference reports «Dynamical Systems Modelling and Stability Investigation», Kyiv, May 24-27, 2011. P.113.
12. **Rozhkov D., Kantorovich S., Sega M.**, Like-charge attraction in confined colloidal systems // DPG Spring Meeting 2011, Технический университет г. Дрезден, Дрезден, Германия, 2011, CPP 38.21.

Монографии и учебные пособия

1. **Вшивков С.А., Зубарев А.Ю., Сафронов А.П.** «Самоорганизация, фазовые переходы и свойства анизотропных сред в магнитном и механическом полях» // Монография. Уральский федеральный университет. Екатеринбург, 2011.

В Приложении 4 приведена копия экспертного заключения о возможности опубликования. Копия опубликованной статьи находится в Приложении 5.

Представления к защите диссертаций

Пьянзина Е.С., Микроструктура и магнитные свойства бидисперсных феррожидкостей с цепочечными агрегатами, диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, Дата представления к защите 17 июня 2011 г., выписка из протокола № 20 объединенного заседания кафедры магнетизма и магнитных наноматериалов и кафедры математической физики Центра классического образования Уральского федерального университета им. первого президента России Б.Н. Ельцина, диссертационный совет Д 212.286.10.

Обобщение основных результатов научных исследований по всем шести этапам проекта.

Все поставленные в проекте цели и задачи выполнены полностью. В соответствии с Календарным планом и Техническим заданием в рамках настоящего проекта были получены следующие конкретные научные результаты.

1-й этап.

Исследован процесс затвердевания трехкомпонентных систем. Сформулирована новая нелинейная модель процесса, состоящая из уравнений тепло- и массопереноса в двух движущихся областях фазового перехода – котектической и основной двухфазных зонах. Найдены интегралы диффузионных уравнений в движущейся области фазового перехода при линейном температурном профиле. Аналитически получены точные решения нелинейной модели: определены распределения температуры, концентраций примеси, долей твердой фазы и законы движения межфазных границ. Показано, что процесс кристаллизации обладает свойством автомодельности, а границы фазовых переходов движутся по законам прямой пропорциональности квадратному корню из времени. Объяснено наличие максимума в распределении концентрации примеси на границе раздела двухфазных зон для затвердевающего в зоне котектики растворенного компонента.

Рассмотрена задача направленного затвердевания бинарных расплавов в автомодельном режиме при малом изменении доли твердой фазы в двухфазной зоне. В таком случае можно

пренебречь зависимостью доли твердой фазы в двухфазной зоне от времени. Использование такого приближения позволило решить задачу аналитически и построить решения для нелинейных уравнений переноса в двухфазной зоне. Полученные решения хорошо согласуются с известными результатами численных решений и решений с помощью разложения в степенные ряды.

Предложены две новые физические модели эффектов сдвигового упрочнения в концентрированных суспензиях. Результаты исследования показывают, что в основе явлений сдвигового упрочнения суспензий могут лежать, как минимум, два физических механизма. Первый – контактное трение между частицами; второй – вязкая диссипация энергии в тонких прослойках жидкости между частицами. В зависимости от условий эксперимента в реальных суспензиях может доминировать либо один, либо другой механизм.

Появление N -образных зависимостей скорости сдвига от приложенного напряжения скорее всего является следствием контактного трения между частицами. С точки зрения предложенных моделей появление сдвигового упрочнения и немонотонной зависимости скорости сдвига от напряжения именно в высоко концентрированных суспензиях вполне понятно – в слабо и умеренно концентрированных системах частицы, при их относительном движении, огибают друг друга, не вступая в физический контакт. В плотных системах для такого огибающего движения просто нет места.

Наблюдаемые осцилляции течения при заданном постоянном напряжении сдвига возникают из-за эффектов гидродинамических неустойчивостей, обусловленных отрицательной дифференциальной вязкостью среды. На феноменологическом уровне такие неустойчивости и осцилляции могут быть описаны при помощи обобщенной модели Максвелла вязкоупругой среды. Наш анализ показывает, что структура осцилляций очень чувствительна к виду зависимости G от σ . К сожалению, развитие микроскопической теории вязкоупругих свойств плотных суспензий и других сложных жидкостей сильно сдерживается отсутствием систематических экспериментальных исследований зависимости модулей вязкоупругости от микроструктуры среды, а также от приложенного механического напряжения и скорости сдвигового течения.

В качественном отношении и по порядку величины наши результаты соответствуют известным экспериментам (см., например, [63-71]). Провести же количественное сопоставление теории с экспериментами на данном этапе исследований не представляется возможным по двум причинам. Во-первых, в известных экспериментальных работах не сообщаются важные детали (в частности, параметры стабилизирующего потенциала U), необходимые для наших расчетов. По-видимому, это вызвано не только трудностями независимого измерения этих параметров, но также и отсутствием микроскопической теории

сдвигового упрочнения, которая бы стимулировала их определение в реологических экспериментах. Во-вторых, вполне вероятно, что в экспериментах эффект сдвигового упрочнения определяется одновременным действием нескольких физических механизмов, каждый из которых может доминировать в определенных экспериментальных условиях. Такими механизмами могут быть, например, рассмотренные здесь эффекты уменьшения средней толщины вязкой прослойки между частицами, а также эффект контактного трения между частицами, возможно, ряд других микроскопических механизмов. Необходимы дальнейшие целенаправленные лабораторные и компьютерные эксперименты, а также теоретические исследования для того, чтобы вскрыть различные механизмы и их роль в формировании макроскопического реологического эффекта в концентрированных суспензиях и других сложных жидкостях.

На примере простейшей модели мы исследовали совместное влияние параметра релаксации напряжения G и времени ретардации T скорости сдвига на автоколебательные течения сложной жидкости в режиме ее отрицательной дифференциальной вязкости. Модель подтверждает гипотезу работы [105] о том, что физической причиной экспериментально наблюдающихся колебательных режимов течений коллоидальных, мицеллярных, полимерных и других сложных жидкостей может быть их отрицательная дифференциальная вязкость. Анализ показал, что увеличение времени ретардации T вызывает уменьшение амплитуды автоколебаний. При фиксированной ширине канала течения и достаточно большом времени T стационарное течение становится устойчивым, несмотря на отрицательный знак дифференциальной вязкости среды.

Для анализа сложных явлений нелинейной стохастической динамики важно иметь количественные характеристики устойчивости и чувствительности. Показатели Ляпунова хорошо известны и традиционно используются для количественного описания степени устойчивости системы в целом. Однако, в исследовании сложных стохастических аттракторов для многомерных систем, необходимо обеспечить количественное детальное описание особенностей их формы и пространственного расположения. Нами предлагается новая компьютерная методика пространственного анализа стохастических аттракторов, основанная на функции стохастической чувствительности. Эта функция обеспечивает конструктивное описание вероятностного распределения для стохастических трехмерных циклов. Наша техника использует конструкцию доверительного тора в качестве простой трехмерной модели стохастического цикла. Доверительные торы описывают основные вероятностные особенности пространственной ориентации и чувствительности стохастических аттракторов. Предлагается эффективный алгоритм построения доверительных торов, использующий дискретный набор эллипсов рассеивания. Эти торы

позволяют визуализировать тонкие пространственные эффекты, наблюдаемые в стохастической модели Ресслера в зоне удвоения периода. Для этой зоны перехода от порядка к хаосу обнаружено самоподобие и геометрический рост стохастической чувствительности возмущенных циклов.

Проведено исследование 3-х феррожидкостей с низкой полидисперсностью и различными параметрами магнитных частиц. Показано, что устойчивые цепочки образуются в системах с параметром диполь-дипольного взаимодействия больше 2. Построена модель феррожидкости с цепочечными агрегатами. При помощи аналитической модели изучено влияние напряженности внешнего магнитного поля на параметры цепочечных агрегатов в феррожидкостях.

2-й этап.

Развиты три различных приближенных аналитических способа для описания процесса образования двухфазной зоны при активном режиме охлаждения области, заполненной твердой и расплавленной фазами. Показано, что скорость кристаллизации для активного режима охлаждения возрастает со временем как линейная функция. Определены аналитические выражения для нахождения времени образования двухфазной зоны, скорости процесса затвердевания и положения фронта кристаллизации в зависимости от теплофизических параметров системы. Построено численное решение задачи о зарождении двухфазной зоны для активного и пассивного режимов охлаждения. Сравнение развиваемой в главе приближенной теории аналитического описания активного режима охлаждения хорошо согласуется с численным решением. Найдены асимптотические выражения для определения концентрационных профилей в жидкой и твердой фазах для достаточно медленных процессов направленной кристаллизации на начальных стадиях их реализации. Поскольку после зарождения двухфазной зоны концентрационного переохлаждения процесс кристаллизации должен описываться в рамках одной из моделей, учитывающей тепломассоперенос в зоне двухфазного состояния вещества, развитые в настоящей работе методы определяют рамки применимости классической термодиффузионной модели Стефана с плоским фронтом для описания процессов направленного затвердевания вещества.

Теоретически исследован процесс изотермического испарения летучего компонента из твердых тел, которые покрыты слоем жидкой фазы. Рассмотрены бинарные соединения, в которых жидкая фаза, покрывающая твердый материал, появляется как продукт его термического разложения. Показано, что для рассматриваемых процессов время релаксации концентрационного поля много меньше характерного времени перемещения границы

плавления, т.е. в каждый момент времени профиль концентрации примеси в слое жидкости является линейной функцией пространственной координаты. Сформулирована новая нелинейная модель процесса испарения в системе твердое тело - жидкость - вакуум, которая является моделью стефановского типа с двумя движущимися границами фазовых переходов - границами испарения и плавления. Найдены точные аналитические решения этой нелинейной модели. Показано, что граница плавления движется быстрее границы испарения, следствием чего является увеличение протяженности слоя жидкости, а увеличение коэффициента испарения ускоряет рост толщины пленки жидкости. Продemonстрировано, что с течением времени концентрационный профиль претерпевает самоподобное смещение, а возрастание коэффициента испарения приводит к увеличению концентрационного градиента во всем слое жидкости и влияет на границе испарения на концентрацию примеси и на поток испаряющегося с нее компонента.

Предложена теория «стоп эффекта», обнаруженного в экспериментах с суспензиями микронных железных частиц в магнетитовой феррожидкости. В основе обнаруженного «стоп эффекта» лежит неоднородность локального магнитного поля в пространстве вблизи железных частиц и то, что это поле максимально вблизи обращенных друг к другу полюсов железных частиц. В результате, вблизи этих полюсов повышается концентрация наночастиц феррожидкости и возникают силы осмотического отталкивания между железными частицами. Точка остановки сближающихся железных частиц определяется конкуренцией между их магнитным притяжением и осмотическим отталкиванием. Дистанция минимального сближения железных частиц слабо чувствительна к концентрации частиц феррожидкости, но очень быстро увеличивается с их размером. Существование щели между намагничивающимися микрочастицами при образовании ими цепочечных и иных гетерогенных кластеров, существенно уменьшает прочность этих кластеров. В свою очередь, уменьшение прочности кластеров приводит к ослаблению реологических свойств магнитной композиции.

В работе предлагается модель кинетики роста цепочечных агрегатов, а также влияния этих процессов на реологические свойства феррожидкостей. Несмотря на упрощения, лежащие в основе этой модели, она позволяет получить оценки для величины вязкости и времени вязкоупругой релаксации феррожидкостей, по крайней мере, по порядку величины, совпадающие со значениями этих величин, измеренными в экспериментах. На основании выполненных расчетов можно сделать вывод о том, что темп эволюции микроскопических цепочечных структур играет определяюще важную роль в формировании макроскопических вязкоупругих свойств феррожидкостей. Необходимо отметить, что важное влияние на реологические свойства реальных феррожидкостей могут оказывать как флуктуационная

гибкость цепочечных агрегатов, так и возникновение капельных и других объемных агрегатов. Изучение этих факторов может рассматриваться как естественное продолжение и обобщение развитой здесь модели.

Разработана методика численного моделирования стохастических аттракторов нелинейных динамических систем в зонах структурно-фазовых превращений, отвечающих бифуркациям удвоения периода и переходам от порядка к хаосу. Теоретической основой методики является разрабатываемая в рамках данного проекта общая конструкция функции стохастической чувствительности. Конструктивные возможности предложенного метода демонстрируются на примерах дискретной модели Ферхюльста и непрерывной популяционной модели хищник-две жертвы. Для важной задачи прямого моделирования стохастических циклов проведен сравнительный анализ ряда традиционно используемых численных схем. В результате исследований выявлено очевидное преимущество линейно-неявной трапециодальной схемы.

Разработана теоретическая модель для вычисления структурного фактора феррожидкости с сильным межчастичным магнитным диполь-дипольным взаимодействием, в которой образуются цепочки, для случаев моно- и бидисперсной систем, в отсутствие внешнего магнитного поля. Разработанный метод основывается на явном построении радиальной функции распределения, в ситуации, когда нам известно равновесное распределение цепочек, полученное путем минимизации функционала плотности свободной энергии системы.

Показано, что степенной показатель D достигает единицы только в отсутствие мелких частиц, и сильно уменьшается с ростом концентрации мелких частиц. Эти результаты показывают потребность в отдельном описании полидисперсности, когда речь идет о реальных феррожидкостях. Показано, что, даже если цепочечные агрегаты есть в феррожидкости, степенной закон может давать $D < 1$. Поэтому только по аномальному поведению структурного фактора при малых волновых векторах q невозможно сделать точные выводы о микроструктуре, что подтверждает необходимость разработанного нами комплексного подхода.

В рамках работы по данному этапу мы провели большую работу по сравнению данных нашей теоретической модели и результатов компьютерных экспериментов в широкой области параметров (концентрации феррочастиц и интенсивности магнитодипольного взаимодействия) показало очень хорошее согласие данных как для моно, так и для бидисперсной систем. Высота первого максимума структурного фактора возрастает как при увеличении концентрации феррочастиц, так и при увеличении параметра магнитодипольного взаимодействия. Это связано с ростом агрегатов в системе и ростом простой

комбинаторной вероятности обнаружить рядом две частицы. Мы показали, что среднее расстояние между частицами в цепочке играет важную роль в теоретическом описании анизотропии структурного фактора, и оно (расстояние) зависит от параметра магнитодипольного взаимодействия λ . Наше исследование бидисперсной системы показало, что структурный фактор реальной бидисперсной системы никогда не совпадает со структурным фактором идеальной бинарной смеси. Согласие, полученное между данными компьютерных экспериментов и предсказаниям теоретической модели, вместе с рядом фактов, которые подтверждают предположения, сделанные в теории, позволяют нам уверенно говорить о том, что разработанная нами модель может быть использована для анализа данных, полученных из экспериментов по нейтронному рассеянию, например, данных о кобальтовых феррожидкостях. Они прекрасно подходят для исследования, поскольку их параметры соответствуют области применимости нашей модели. Полидисперсность таких систем не является препятствием для анализа, поскольку непрерывное распределение частиц по размерам хорошо аппроксимируется бидисперсным распределением. Если теоретический подход, разработанный нами, успешно сочетать с компьютерными экспериментами, мы получим возможность для обобщения данного подхода на большее число фракций. К тому же, разработанный нами комбинированный подход может помочь обнаружить прямую связь между экспериментальными данными по малоугловому нейтронному рассеянию и микроструктурой, поскольку тяжело использовать теорию, компьютерные эксперименты и натурные эксперименты по отдельности.

В работе был разработан метод, позволяющий исследовать структуру основного состояния тонкого слоя магнитной жидкости. Были найдены точные формулы для расчета энергии цепочки, идеального кольца, вложенных колец и двух колец рядом. Основной вывод: идеальное кольцо из всех частиц системы имеет наименьшую энергию - является основным состоянием. Данный результат справедлив в отсутствии пространственных ограничений и внешнего магнитного поля. Анализ влияния данных факторов на топологию основного состояния ведется нами в данный момент.

Исследована задача анализа доверительных областей стохастических аттракторов. Предложен новый метод описания трехмерных стохастических аттракторов в сечениях Пуанкаре с помощью доверительных эллипсов. При этом информация о размере и пространственном расположении доверительных эллипсов дает возможность описать и эффективно предсказать основные черты индуцированных шумом переходов.

Представлен метод вычисления третьего вириального коэффициента – посредством постановки компьютерного эксперимента. Было проведено две серии компьютерных экспериментов. В рамках этих экспериментов получены данные, которые позволили

определить значения второго и третьего вириальных коэффициентов для жидкости Леннарда-Джонса. Исследовано поведение данных коэффициентов в зависимости от температуры. Произведен сравнительный анализ второго вириального коэффициента для случая монослоя и объема и для третьего вириального коэффициента соответственно. Из анализа поведения третьего вириального коэффициента жидкости Леннарда-Джонса, был сделан вывод о том, что его поведение в монослое отличается от случая объема не только количественно, но и качественно. Таким образом, вкладом трехчастичных взаимодействий в уравнение состояния системы для жидкости Леннарда-Джонса и для системы, описывающей поведение магнитной жидкости в монослое, пренебрегать нельзя.

3-й этап.

В работе рассмотрен рост свободного дендрита в жидкую фазу системы при наличии в ней набегающего потока. Термодиффузионная модель процесса основана на стефановском приближении фронтальной границы между растущим кристаллом и окружающей его жидкостью и гидродинамических уравнениях Осеена. Из условия микроскопической разрешимости на основе линейного анализа устойчивости получен критерий устойчивого роста двумерного параболического дендрита с учетом анизотропии поверхностного натяжения на межфазной границе кристалл-расплав. Найденный критерий содержит ранее полученные критерии для роста изолированного дендрита в однокомпонентной среде с конвекцией жидкости и роста изолированного дендрита в неподвижной бинарной системе. Показано, что развиваемая теория справедлива при произвольных числах Рейнольдса и Пекле, определяемых скоростью набегающего на дендрит потока жидкости.

Проведены теоретические исследования микроскопических механизмов эффектов сдвигового упрочнения в плотных суспензиях, а также образования мезоскопических гетерогенных агрегатов и динамических свойств концентрированных магнитных суспензий. Предложена модель механизма сдвигового упрочнения, основанная на анализе диссипативных явлений в тонких слоях вязкой жидкости между плотно расположенными частицами суспензий. Модель впервые без использования подгоночных параметров позволила описать ряд экспериментов по сдвиговому упрочнению суспензий.

Развита теоретическая модели и проведены компьютерные эксперименты по кинетике формирования гетерогенных цепочечных структур в суспензиях намагничивающихся небруоновских частиц. Аналитические расчеты находятся в хорошем согласии с компьютерными экспериментами. Предложена теория динамических свойств магнитных жидкостей с учетом магнитодипольного взаимодействия однодоменных

ферромагнитных наночастиц. Результаты расчетов хорошо соответствуют компьютерным экспериментам.

Для произвольных компактных инвариантных многообразий, служащих универсальной математической моделью установившихся режимов гетерогенных динамических систем построена общая теория функции стохастической чувствительности. Для конструирования этой функции в классических случаях стохастического равновесия и цикла предложены эффективные методы. Исследовательские возможности разработанных методов демонстрируются на примере анализа модели динамики сложной жидкости, что позволило на качественном уровне выявить физическую природу экспериментально обнаруженных новых нелинейных явлений в реологии сложных жидкостей.

В экспериментах по исследованию потоков высококонцентрированных сложных жидкостей была обнаружена N-образная нелинейная зависимость между вязким напряжением и скоростью деформационного течения. Если течение суспензии возбуждалось постоянным напряжением, попадающим на убывающую ветвь этой зависимости, то стационарное течение теряло устойчивость и возникали сильные осцилляции скорости течения. Показано, что колебания, обнаруженные в экспериментах, возникают в зоне параметров, где равновесие теряет устойчивость, а система в качестве аттракторов имеет устойчивые предельные циклы. Центральное место в работе занимает исследование реакции системы на случайные возмущения. На основе метода функции стохастической чувствительности проведен параметрический анализ стохастических аттракторов системы. Показано, что с увеличением жесткости стохастическая чувствительность автоколебаний резко возрастает. Выявлена узкая зона сверхвысокой чувствительности автоколебаний, когда даже малые помехи приводят к существенным флуктуациям их амплитуды.

В настоящей работе приведены результаты вычисления парной функции распределения и свободной энергии монодисперсной магнитной жидкости, моделируемой жидкостью дипольных твердых сфер. Рассмотрено групповое разложение, представляющее парную функцию распределения и свободную энергию в виде ряда по степеням объемной концентрации φ и параметра магнито-дипольного взаимодействия λ . Приведены точные выражения для вклада диполь-дипольного взаимодействия в свободную энергию системы дипольных твердых сфер с точностью до φ^2 и λ^3 . Приведены точные выражения для парной функции распределения в рамках ограничения двух- и трехчастичными диаграммами с точностью до φ и λ^4 . Данное ограничение описывает межчастичные корреляции в концентрированных феррожидкостях с умеренной интенсивностью межчастичных магнито-дипольных взаимодействий ($\lambda < 2$).

В отсутствие магнитного поля парная функция распределения демонстрирует первый пик и слабо выраженный второй максимум, соответствующие первой и второй координационным сферам. Показано, что нецентральное магнитное диполь-дипольное взаимодействие в коллективе феррочастиц проявляется неоднозначным образом: вклады четных степеней: λ^2, λ^4 свидетельствуют о коллективном межчастичном притяжении, в то время как вклады: λ^3 демонстрируют эффективное межчастичное отталкивание.

Анизотропная часть парной функции в магнитном поле рассчитана в низшем порядке теории возмущений по λ в ограничении вторым полиномом Лежандра по углу относительно направления магнитного поля. Показано, что анизотропия межчастичных магнитно-дипольных корреляций в магнитном поле проявляется даже для слабо концентрированных и слабо неидеальных феррожидкостей. Анализ анизотропной парной функции распределения системы феррочастиц в магнитном поле продемонстрировал явную тенденцию к формированию димеров феррочастиц вдоль направления поля. В то же время в перпендикулярном полю направлении полностью пропадает первый пик в парной функции распределения, что соответствует преобладанию межчастичного отталкивания.

Рассчитанная парная функция распределения использована для изучения структурного фактора и его анизотропии в магнитном поле. Увеличение интенсивности магнитно-дипольного взаимодействия приводит к незначительному росту первого пика структурного фактора и его смещению в область больших значений волнового вектора. Причиной смещения является формирование первой координационной сферы в парной функции распределения и установлению ближнего порядка, характерного для жидкостей.

Обнаружено, что наличие внешнего магнитного поля приводит к сильной анизотропии структурного фактора даже для слабо концентрированных феррожидкостей с невысокой интенсивностью межчастичного магнитно-дипольного взаимодействия. Усиление магнитного поля приводит к сильному росту первого максимума структурного фактора в продольном вдоль поля направлении и ослаблению всех экстремумов структурного фактора в перпендикулярном направлении. Последняя тенденция свидетельствует о том, что в перпендикулярном полю направлении притягивающие и отталкивающие межчастичные корреляции взаимно компенсируют друг друга. Поэтому структурный фактор характеризуется поведением, близким для идеального газа невзаимодействующих частиц.

4-й этап.

Развиты численно-аналитические методы решения базовых задач направленного тепло- массообмена и гидромеханики при фазовых и химических превращениях. Развитые

методы основаны на спрямлении границы и называются модифицированными методами граничных элементов. Методы позволяют решать соответствующие нелинейные задачи с движущимися границами фазовых переходов за более короткое время. В работе получены временные оценки применения этих методов и исследованы вопросы их сходимости. А именно, развита математическая модель процессов затвердевания от охлаждаемой по произвольному закону границы в присутствии двухфазной зоны для неизотермического расплава в отсутствие и при наличии турбулизации жидкости на границе между двухфазной зоной и жидкой фазой системы. Определены распределения температуры, концентрации примеси и доли твердой фазы во всех регионах протекания процесса, найден закон движения границы твердая фаза - двухфазная зона. Рассмотрены два сценария процесса: с нулевой (который описывает затвердевание с кристаллами игольчатой формы) и отличной от нуля (который описывает затвердевание с кристаллами с затупленной формой концов) долями твердой фазы на границе двухфазная зона - жидкость. Результаты развитой теории находятся в хорошем соответствии с данными наблюдений.

Развита теория нелинейной вязкоупругости в концентрированных полярных и неполярных суспензиях. В работе предлагается модель кинетики роста цепочечных агрегатов, а также влияния этого процесса на реологические свойства феррожидкостей. Несмотря на упрощения, лежащие в основе предложенной модели, она позволяет получить оценки для величины вязкости и времени вязкоупругой релаксации феррожидкости, по крайней мере, по порядку величины, совпадающие со значениями этих величин, измеренными в экспериментах. На основании выполненных расчетов можно сделать вывод о том, что темп эволюции микроскопических цепочечных структур играет определяющую роль в формировании макроскопических вязкоупругих свойств этих систем. Необходимо отметить, что на реологические свойства реальных феррожидкостей важное влияние могут оказывать как флуктуационная гибкость цепочек, так и возникновение и эволюция капельных и других гетерогенных агрегатов. Изучение этих факторов может рассматриваться как естественное продолжение и обобщение развитой здесь модели.

Построена теория кинетики роста внутренних гетероструктур в магнитных суспензиях под влиянием внешнего магнитного поля. Предложена теоретическая модель кинетики эволюции цепочечных агрегатов в суспензии не броуновских намагничивающихся частиц. Несмотря на сильные упрощения, результаты этой модели находятся в разумном согласии с результатами двумерного компьютерного эксперимента, когда поверхностная концентрация частиц порядка нескольких процентов. Поэтому предложенная модель может рассматриваться как надежное основание для дальнейшего моделирования кинетики образования цепочек в низко-и умеренно концентрированных магнитных и иных полярных

суспензиях не броуновских частиц. Результаты такого моделирования являются основой для расчета динамики изменения реологических характеристик таких сред после их внесения в магнитное поле. Дальнейшее развитие модели должно быть связано с учетом бокового агрегирования цепочек, образования ветвистых и объемных структур.

Исследована динамика стохастической чувствительности колебаний при переходе к хаосу, стохастического самоподобия и универсальности. Разработана программа для моделирования и визуализации динамики стохастических колебаний при переходе к хаосу. В работе были рассмотрены детерминированные и стохастические аттракторы (равновесия и циклы) системы Ферхюльста в зоне бифуркаций удвоения периода при переходе к хаосу. Для исследования отклика аттракторов на малые случайные возмущения использовался метод функций стохастической чувствительности. Для системы Ферхюльста со случайными возмущениями представлена стохастическая бифуркационная диаграмма, дающая общую картину чувствительности равновесий и циклов системы к случайным возмущениям. Показано общее повышение чувствительности при переходе к хаосу. Точную количественную оценку влияние шума на равновесия и предельные циклы детерминированной системы дает функция стохастической чувствительности. Данная функция позволяет сравнить между собой восприимчивость всех точек аттрактора к случайным воздействиям и проследить изменения чувствительности как на интервале структурной устойчивости, так и при последовательных бифуркациях удвоения периода. Для построения функции чувствительности применялся как эмпирический подход, использующий прямое численное моделирование, так и метод ФСЧ, основанный на системах первого приближения. Показано явное увеличение чувствительности системы Ферхюльста к случайным возмущениям в цепи бифуркаций удвоения периода. Найдено значение показателя геометрического роста чувствительности стохастических суперциклов. Была доказана универсальность данного показателя роста для целого класса систем с квадратичным максимумом и его независимость от вида мультипликативного шума.

Вычислена парная корреляционная функция концентрированной магнитной жидкости методом диаграммного (вириального) разложения в магнитном поле. Исследована анизотропия структурного фактора концентрированной магнитной жидкости во внешнем магнитном поле. Исследованы термодинамические свойства стерически и ионно стабилизированных магнитных жидкостей: осмотическое давление, теплоемкость. Изучена анизотропия диффузионных процессов в магнитных жидкостях в магнитном поле. В отчете приведены результаты вычисления парной функции распределения монодисперсной магнитной жидкости и структурного фактора рассеяния во внешнем магнитном поле. Магнитная жидкость моделировалась системой дипольных твердых/мягких сфер.

Рассмотрено групповое разложение, представляющее парную функцию распределения и осмотическое давление концентрированной магнитной жидкости в виде ряда по степеням объемной концентрации φ и параметра магнито-дипольного взаимодействия λ . Приведены точные выражения для парной функции распределения, структурного фактора, осмотического давления, изотермической сжимаемости и теплоемкости при постоянном объеме. Теоретические результаты хорошо согласуются с данными компьютерного моделирования и могут быть применимы для описания термодинамических и структурных свойств в концентрированных феррожидкостях с невысокой интенсивностью межчастичных магнито-дипольных взаимодействий ($\lambda < 2$). Выведено динамическое уравнение диффузии для концентрированной магнитной жидкости, описывающее магнитофорез, седиментацию коллоидных частиц и диффузионные процессы с учетом стерических, магнитодипольных и гидродинамических взаимодействий между частицами. Коэффициент диффузии коллоидных частиц записан с учетом стерических и магнитодипольных межчастичных взаимодействий. Стерические взаимодействия учитываются в рамках аппроксимации Карнагана-Старлинга для системы твердых сфер. Для учета эффективного притяжения частиц, обусловленного магнитодипольными межчастичными взаимодействиями, свободная энергия системы твердых сфер представлена в виде вириального разложения с точностью до членов, квадратичных по концентрации частиц. Вириальное разложение использовано для получения интерполяционной формулы, хорошо согласующейся с данными численного моделирования в широком диапазоне концентраций частиц и энергии межчастичных взаимодействий. Этим самым заложена основа для постановки краевых задач и расчета концентрационных и магнитных полей в устройствах, использующих магнитную жидкость в качестве рабочей. Аналитически исследовано расслоение магнитной жидкости, возникающее под действием гравитационного поля в круглом цилиндре конечной высоты. Коэффициент разделения раствора по концентрации частиц рассчитан в зависимости от средней концентрации и параметра магнитодипольных взаимодействий. Показано, что эти взаимодействия многократно усиливают неоднородность жидкости по концентрации, если средняя объемная доля частиц не превышает 30%. При больших концентрациях их влияние на распределение частиц в цилиндре быстро убывает и становится пренебрежимо малым. Главную роль играют стерические взаимодействия.

Полученные результаты показывают, что поставленные задачи решены полностью. Уровень полученных результатов соответствует мировому уровню, о чем свидетельствуют публикации коллектива авторов в престижных реферируемых изданиях. Использование полученных результатов будет осуществляться в научной работе по пятому и шестому этапам, а также в учебном процессе в Уральском государственном университете.

5-й этап.

В работе исследована зависимость вязкости η магнитной жидкости от скорости сдвига $\dot{\gamma}$ и приложенного магнитного поля H . Предполагалось, что нелинейные реологические эффекты в магнитных жидкостях объясняются объединением коллоидных феррочастиц в линейно-цепочечные кластеры.

Теоретические результаты качественно и по порядку величины соответствуют известным экспериментам. Результаты расчетов были интерпретированы в рамках традиционного реологического закона $\eta - \eta_0 \propto \dot{\gamma}^{-\Delta}$, где η_0 – вязкость несущей среды. В рамках разработанной модели, в отличие от традиционных моделей и в согласии с экспериментами, показатель Δ не является постоянной величиной, а растет с увеличением скорости сдвига $\dot{\gamma}$ и с приложенным магнитным полем.

Физической причиной зависимости Δ от $\dot{\gamma}$ и поля H является броуновское движение частиц и разрушение агрегатов за счет испарения из них частиц, игнорируемое в традиционных моделях реологических свойств магнитных суспензий.

Исследована релаксация вязкости магнитной жидкости после скачкообразного изменения $\dot{\gamma}$. Показано, что время релаксации сложным образом зависит от величины и характера изменения $\dot{\gamma}$.

Нужно отметить, что для рассматриваемой задачи, когда образование цепочек приводит к существенному росту вязкости феррожидкости, модель невзаимодействующих цепочек представляется весьма сильным приближением. Однако, математически корректная, или надежно экспериментально апробированная теория, позволяющая учитывать гидродинамические взаимодействия вытянутых частиц (цепочек) в литературе отсутствует.

В то же время, опыт использования приближения невзаимодействующих цепочек (плотных капель) применительно к задачам о реологических эффектах в магнитных суспензиях разной природы, показывает, что приближение невзаимодействующих агрегатов приводит к разумным совпадениям с экспериментами, по крайней мере, по порядку величины. Это дает основание надеяться, что и при описании нестационарных, релаксационных явлений такой подход позволяет учесть принципиально важные моменты микроскопического формирования макроскопических вязкоупругих явлений в феррожидкостях. Согласие наших расчетов с результатами экспериментов подтверждает принципиальную адекватность модели невзаимодействующих цепей, по крайней мере, для небольших концентраций феррочастиц, образующих эти цепочки.

В работе сформулирована математическая модель процесса неизотермического испарения летучего соединения из твердого тела в вакуум через слой жидкой пленки, который покрывает поверхность твердого вещества. Рассмотрены бинарные системы, в которых жидкая фаза появляется как продукт термического разложения твердого вещества. Разработан способ аналитического решения нестационарной нелинейной модели с двумя движущимися границами фазовых переходов. Определены явные решения задачи в параметрическом виде. Найдены распределения температуры и концентрации примеси в слое жидкости, законы движения межфазных границ и поток летучего компонента, испаряющегося в вакуум с поверхности тонкой пленки жидкости. Показано, что увеличение температуры фазового перехода и начальной толщины пленки приводит к увеличению относительного потока испаряющегося компонента и к уменьшению относительной толщины жидкой пленки. Продемонстрировано, что возрастание коэффициента испарения уменьшает относительный поток испаряющегося вещества, а увеличение относительной протяженности пленки жидкости может быть вызвано как увеличением, так и уменьшением коэффициента испарения на различных временах процесса.

На основе модели магнитной жидкости как системы дипольных твердых сфер определяются магнитостатические свойства феррожидкости, такие как намагниченность и начальная магнитная восприимчивость. Для описания свойств концентрированных систем особое внимание уделяется исследованию многочастичных корреляций в ориентациях магнитных моментов и расположениях феррочастиц.

В данном проекте разработан общий подход к анализу стохастической устойчивости автоколебаний, использующий конструкции стохастических линейных расширений, метод функций Ляпунова, теорию положительных операторов. В результате, исследование стохастической устойчивости сложных автоколебательных процессов (периодических и квазипериодических) удалось свести к конструктивной задаче оценки спектрального радиуса некоторого положительного оператора. Для отыскания спектрального радиуса построены эффективные итерационные численные алгоритмы, доказана их сходимость, разработаны необходимые программные средства. Конструктивные возможности разработанных компьютерных средств продемонстрированы на решении ряда практических примеров.

6-й этап.

Результаты исследований представлены выше в настоящем отчете.

Список публикаций за весь срок выполнения проекта

Монография

1. **Ряшко Л.Б., Башкирцева И.А.**, Стохастические аттракторы нелинейных динамических систем, Екатеринбург: Изд-во Уральского университета, 2010, 251с.

Статьи в российских журналах:

1. **Александров Д.В.**, Нелинейная динамика системы жидкость-кристалл при испарении летучего компонента // Доклады Академии Наук, 2009, Т. 428, N 4, С. 465-468.

2 **Александров Д.В., Низовцева И.Г.** Нестационарная кристаллизация воды с двухфазной зоной при турбулентных и нетурбулентных граничных условиях // Вестник Самарского государственного технического университета, Сер. физ.-мат. науки, 2010.- N 1.- С. 133-142.

3. **Александров Д.В., Асеев Д.Л., Малыгин А.П.**, К теории процессов затвердевания с неравновесной двухфазной зоной // Расплавы, 2011, N 1, С. 16-30.

4. **Башкирцева И.А., Зубарев А.Ю., Исакова Л.Ю., Ряшко Л.Б.**, К реофизике высококонцентрированных суспензий // Коллоидный журнал, 2009, Т.71, N 4, С. 444-453.

5 **Башкирцева И.А., Перевалова Т.В., Ряшко Л.Б.** Аализ индуцированных шумом переходов в системе Хопфа // Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика, 2010.- Т. 18.- С. 37-50.

6 **Башкирцева И.А., Зубарев А.Ю., Исакова Л.Ю., Ряшко Л.Б.** К теории осциллирующих течений в сложных жидкостях // Коллоидный журнал, 2010.- Т. 72.- С. 147-151.

2. **Башкирцева И.А., Ряшко Л.Б.**, Об управлении стохастической чувствительностью дискретных систем // Автоматика и телемеханика, 2010, № 9, с. 103-119.

7. **Башкирцева И.А., Ряшко Л.Б., Федотов С.В., Цветков И.Н.**, Обратные стохастические бифуркации циклов дискретных систем // Нелинейная динамика, 2010, Т. 6, №4, с. 737–753.

8. **Башкирцева И.А., Карпенко Л.В., Ряшко Л.Б.**, Стохастическая чувствительность предельных циклов модели "хищник - две жертвы" // Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика, 2010, Т.18, №6, с. 42-64.
9. **Башкирцева И.А., Ряшко Л.Б., Федотов С.П., Цветков И.Н.**, Обратные стохастические бифуркации в системе Эно // Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика, 2011.- Т.19. №2. - С. 31-42.
10. **Зверев В.С.**, Моделирование поверхностной реакционной диффузии и численное решение // Математическое моделирование, 2010, Т. 22, с. 82-92.
11. **Зубарев А.Ю., Чириков Д.Н.** К теории магнитовязкого эффекта в феррожидкостях // ЖЭТФ, 2010.- Т. 110.- С. 995-1004.
12. **Зубарев А.Ю., Исакова Л.Ю., Костенко В.О.** Кинетика роста цепочечных агрегатов в магнитных суспензиях // Коллоидный журнал, 2010, т. 72, N 6, С. 791-797.
13. **Зубарев А.Ю., Исакова Л.Ю., Чириков Д.Н.**, К нелинейной реологии магнитных жидкостей // Коллоидный журнал, 2011, Т. 73, с. 320-333.
14. **Иванов А.О., Елфимова Е.А.** Парные корреляции в магнитных нанодисперсных жидкостях // Журнал экспериментальной и теоретической физики, 2010, Т. 137 , вып. 5, с. 1-13.
15. **Минина Е.С., Канторович С.С.**, Моделирование третьего вириального коэффициента для двумерного дипольного взаимодействия в монослое // Известия вузов, Физика, 2009, Т. 52.
16. **Цветков И.Н.**, Стохастические бифуркации циклов системы Ферхюльста // Системы управления и информационные технологии, 2009, Т. 3.1, N 37, С. 199-202.

Статьи в трудах конференций:

1. **Данилов В.А., Прокопьева Т.А., Канторович С.С.** Моделирование микроструктуры тонкого слоя магнитной жидкости // Труды 14 международной плесской конференции по нанодисперсным магнитным жидкостям, 2010, С. 405-410.
2. **Елфимова Е.А., Иванов А.О., Крутикова Е.В., Менделев В.С.** Термодинамические свойства магнитных жидкостей: изотермическая сжимаемость и теплоемкость // Труды 14 международной плесской конференции по нанодисперсным магнитным жидкостям, 2010, С. 95-100.
3. **Елфимова Е.А., Иванов А.О., Ефимова В.А., Турышева Е.В.** Начальная восприимчивость концентрированной магнитной жидкости // Труды 14 международной плесской конференции по нанодисперсным магнитным жидкостям, 2010, С. 101-105.
4. **Елфимова Е.А., Епифанов Ю.А.** Определение четвертого вириального коэффициента в разложении свободной энергии магнитной жидкости // Труды 14 международной плесской конференции по нанодисперсным магнитным жидкостям, 2010, С.163-168.
5. **Минина Е.С., Добросердова А.Б., Серда Д., Канторович С.С.** Бидисперсные монослои: теория и эксперимент // Труды 14 международной плесской конференции по нанодисперсным магнитным жидкостям, 2010.- С. 411-416.
6. **Пьянзина Е.С.** Структурный фактор феррожидкостей с цепочечными агрегатами: влияние внешнего магнитного поля. // Сборник трудов всероссийской научной школы для молодежи «современная нейтронография: фундаментальные и прикладные исследования функциональных и наноструктурированных материалов», 2010.- С. 27-30.
7. **Lee D., Alexandrov D.V., Huang H.-N.** Report on solving a real-life solidification problem by a mushy layer model // Proceedings of 8th Taiwan-Philippines Symposium on Analysis, Taichung, Taiwan, 23-25 October 2009, P. 165-188.

Статьи в зарубежных журналах:

1. **Alexandrov D.V., Ivanov A.A.,** Solidification of a ternary melt from a cooled boundary, or nonlinear dynamics of mushy layers // International Journal of Heat and Mass Transfer, 2009, Vol. 52, P. 4807-4811.

2. **Alexandrov D.V., Nizovtseva I.G.,** Lee D., Huang H.-N. Solidification from a cooled boundary with a mushy layer under conditions of nonturbulent and turbulent heat and mass transfer in the ocean // International Journal of Fluid Mechanics Research, 2010.- Vol. 37.- P. 1-14.

3. **Alexandrov D.V., Malygin A.P.** The Stefan problem for unsteady-state evaporation of a volatile component in the solid-liquid-gas systems: exact analytical solution // International Journal of Heat and Mass Transfer, 2010.- Vol. 53.- P. 2790-2794.

4. **Alexandrov D.V.,** Galenko P.K., Herlach D.M. Selection criterion for the growing dendritic tip in a non-isothermal binary system under forced convective flow // Journal of Crystal Growth, 2010.- Vol. 312.- P. 2122-2127.

5. **Alexandrov D.V., Rakhmatullina I.V., Malygin A.P.** On the theory of solidification with a two-phase concentration supercooling zone // Russian Metallurgy (Metally), 2010.- N 8.- P. 745-750.

6. **Alexandrov D.V., Malygin A.P.** Phase transitions in solid-liquid-gas systems with applications to alkali metal generators // Physica A, 2010.- Vol. 389.- P. 2063-2069.

7. **Bashkirtseva I., Ryashko L., Stikhin P.** Noise-induced backward bifurcations of stochastic cycles // Fluctuation and Noise Letters, 2010.- Vol. 9.- P. 89-106.

8. **Bashkirtseva I.,** Chen G., Ryashko L. Analysis of Stochastic Cycles in the Chen System // International Journal of Bifurcation and Chaos in Applied Sciences and Engineering, 2010.- Vol. 20, No. 5.- P. 1439–1450

9. **Bashkirtseva I., Ryashko L., Tsvetkov I.** Sensitivity Analysis of Stochastic Equilibria and Cycles for the Discrete Dynamic Systems // Dynamics of Continuous, Discrete and Impulsive Systems, 2010.- Vol. 17.- P. 501-515.

10. **Bashkirtseva I., Ryashko L.,** Synthesis of stochastic attractors for nonlinear dynamical systems and controlling chaos // Neural, Parallel, and Scientific Computations, 2010, Vol. 18, P. 401-408.

11. Bossis G., Lopez-Lopez M., **Zubarev A.**, Microdynamics of magnetic particles dispersed in complex media // International Journal of Modern Physics B, 2011, Vol. 25, P. 905-910.
12. Cerda J., **Elfimova E.**, Ballenegger V., **Krutikova E.**, **Ivanov A.**, Holm C. Behavior of bulky ferrofluids in the diluted low coupling regime: theory and simulation // Physical Review E, 2010.- Vol. 81.- P. 011501-011501-11.
13. Cerda J.J., **Elfimova E.A.**, Ballenegger V., **Krutikova E.**, **Ivanov A.**, Holm C., Study of the structure factor anisotropy and long range correlations of ferrofluids in the dilute low-coupling regime // Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 2011, Vol. 323, N 10, P. 1246-1253.
14. Chuntunov K., **Ivanov A.**, **Permikin D.**, Getter films with a reactive component // Vacuum, 2011, Vol. 85, P. 755-760.
15. Lee D., **Alexandrov D.V.** Numerical modeling of one-dimensional binary solidification – the classical two-phase Stefan problem // International Journal of Pure and Applied Mathematics, 2010.- Vol. 58.- P. 381-416.
16. **Ivanov A.O.**, **Kuznetsova O.B.**, Subbotin I.M., Magnetic properties of ferrofluid emulsions: model of non-interacting droplets // Magnetohydrodynamics, 2011, Vol. 47, N 2, P. 3-8.
17. Kuzhir P., Gomez-Ramirez A., Lopez-Lopez M.T., Bossis G., **Zubarev A.Yu.**, Non-linear viscoelastic response of magnetic fiber suspensions in oscillatory shear // Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 2011, Vol. 166, P. 373–385.
18. López-López M.T., **Zubarev A.Yu.**, Bossis G. Repulsive force between two attractive dipoles, mediated by nanoparticles inside a ferrofluid // Soft Matter, 2010.- Vol. 6.- P. 436.
19. Lopez-Lopez M.T., Duran J.D.G., Rodriguez-Arco L., **Zubarev A.**, **Iskakova L.** Effect of gap thickness on the viscoelasticity of magnetorheological fluids // J. Appl. Physics, 2010.- 108.- P. 083503.
20. **Martyushev L.M.** The maximum entropy production principle: two basic questions // Phil. Trans. Roy. Soc. B, 2010.- Vol. 365.- P. 1333-1334.

21. **Prokopieva T., Danilov V., Kantorovich S.,** Holm C., Ground state structures in ferrofluid monolayers // Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 2011, Vol. 323, N 10, P. 1298.
22. **Prokopieva T.A., Danilov V.A., Kantorovich S.S.,** Holm C., Ground state structures in ferrofluid monolayers // Physical Review E, 2009, Vol. 80, N 3, P. 031404-01-13.
23. **Pshenichnikov A.F., Elfimova E.A., Ivanov A.O.,** Magnetophoresis, sedimentation and diffusion of particles in concentrated magnetic fluids // J. Chem. Phys., 2011, Vol. 134, N18, P. 184508-1-9.
24. **Pyanzina E., Cerda J., Kantorovich S.,** Holm C., Structure factor of ferrofluids with chain aggregates: Theory and computer simulations // Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 2011, Vol. 323, N 10, P. 1263.
25. **Ryashko L., Bashkirtseva I., Gubkin A., Stikhin P.,** Confidence tori in the analysis of stochastic 3D-cycles // Mathematics and Computers in Simulation, Vol. 80, 2009, P. 256–269.
26. **Ryashko L., Bashkirtseva I.,** Analysis of stochastic attractors for population dynamical systems with environmental noise // Neural, Parallel, and Scientific Computations, 2010, Vol. 18, P. 433-440.
27. **Ryashko L., Bashkirtseva I.,** Analysis of excitability for the FitzHugh-Nagumo model via a stochastic sensitivity function technique // Phys. Rev. E, 2011, Vol. 83, P. 061109-061117.
28. **Weeber R., Kantorovich S., Cerda J., Holm C.,** Magnetic particles with shifted dipoles // Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 2011, Vol. 323, N 10, P. 1269.

Доклады на всероссийских конференциях и семинарах:

1. **Александров Д.В., Иванов А.А.,** Направленная кристаллизация трехкомпонентных сплавов с образованием двухфазных зон: аналитическое решение, Тезисы докладов Юбилейной X Всероссийской молодежной школы-семинара по проблемам физики конденсированного состояния вещества, Екатеринбург, 9-15 ноября 2009, С. 67.

2. **Башкирцева И.А., Ряшко Л.Б.** Управление стохастическими аттракторами дискретных систем в зоне перехода от порядка к хаосу. Тез. докладов XI международной конференции «Устойчивость и колебания нелинейных систем управления», Москва ИПУ РАН, 2010, С.43-44.
3. **Башкирцева И.А., Кошелев Г.Н.** Исследование стохастических аттракторов модели Чена. Тезисы 41-й Всероссийской молодежной конференции «Проблемы теоретической и прикладной математики», Екатеринбург, 2010, С.210-215.
4. **Башкирцева И.А., Перевалова Т.В.** Компьютерное моделирование и анализ 2D-аттракторов стохастических систем. Тезисы 41-й Всероссийской молодежной конференции «Проблемы теоретической и прикладной математики», Екатеринбург, 2010, С. 216-222.
5. **Башкирцева И.А., Ряшко Л.Б.** Методы управления стохастическими нелинейными колебаниями. Тез. докладов X Крымской международной математической школы «Метод функций Ляпунова и его приложения». Таврический национальный университет, Симферополь, 2010, с.15.
5. **Бояршинова П.В., Башкирцева И.А.** Исследование динамики модели «Конкуренция хищника за отличные от жертвы ресурсы и насыщение хищника». Тезисы 41-й Всероссийской молодежной конференции «Проблемы теоретической и прикладной математики», Екатеринбург, 2010, С. 223-229.
6. **Бояршинова П.В., Ряшко Л.Б.,** Анализ стохастических аттракторов модели «хищник-жертва» // Тезисы 42-й Всероссийской молодежной школы-конференции «Современные проблемы математики», Екатеринбург, 2011, с. 73-75.
7. **Губкин А.А.** Реализация алгоритмов анализа стохастической устойчивости циклов в зоне бифуркаций удвоения периода. Тезисы 41-й Всероссийской молодежной конференции «Проблемы теоретической и прикладной математики», Екатеринбург, 2010, С.237-243.
8. **Елфимова Е.А., Ефимова В.А., Иванов А.О.,** Ориентация магнитных моментов пары феррочастиц при учете многочастичных взаимодействий в магнитной жидкости // Тезисы докладов 17 зимней школы по механике сплошных сред, 2011, Пермь.- с. 106.

9. **Елфимова Е.А., Иванов А.О., Турышева Е.В.**, Магнитные свойства концентрированных феррожидкостей. Влияние межчастичных корреляций // Тезисы докладов 17 зимней школы по механике сплошных сред, 2011, Пермь.- с. 107.
10. **Елфимова Е.А., Крутикова Е.В.**, Исследование парной корреляционной функции бидисперсной магнитной жидкости // Тезисы докладов 17 зимней школы по механике сплошных сред, 2011, Пермь.- с. 184.
11. **Елфимова Е.А., Кузнецов А.С.**, Межчастичные корреляции в концентрированных магнитных наножидкостях: влияние внешнего однородного магнитного поля // Тезисы докладов 17 зимней школы по механике сплошных сред, 2011, Пермь.- с. 185.
12. **Зверев В.С., Иванов А.О.**, Моделирование и численное решение поверхностной диффузии с фронтальной взаимодействии веществ при условии испарения // Тезисы докладов Всероссийской конференции молодых ученых "Неравновесные процессы в сплошных средах" Пермь, 2011, с. 28.
13. **Зверев В.С.**, Современные проблемы математики: Тезисы 42-й Всероссийской молодежной школы-конференции, Екатеринбург: УрО РАН, 2011 г., с. 83-86.
14. **Зубарев А.Ю., Чириков Д.Н.**, "Вязкоупругие свойства феррожидкостей», Сб. трудов 14-ой Международной Плесской научной конференции по нанодисперсным магнитным жидкостям, 7-10 сентября 2010, Изд. Ивановского гос. университета.
15. **Зубарев А.Ю., Чириков Д.Н.**, Вязкоупругие свойства магнитных жидкостей. 14-я Зимняя школа по механике сплошных сред. Пермь, ИМСС, 28.02-03.03. 2011.
16. **Зубарев А.Ю., Костенко В.О.**, Кинетика агрегирования магнитных суспензий. Зимняя школа по механике сплошных сред. Пермь, ИМСС, 28.02-03.03. 2011.
17. **Иванов А.О., Менделев В.С.**, Магнитные свойства феррожидкостей с цепочечными агрегатами: теория и эксперимент, Сб. трудов 2-ой Всероссийской научной конференции «Физико-химические и прикладные проблемы магнитных дисперсных наносистем», СтавГУ, Ставрополь, сентябрь, 2009, С. 93-98.

18. **Иванов А.О., Кузнецова О.Б., Субботин И.М.**, Магнитожидкостные эмульсии: модель невзаимодействующих капель // Тез. докл. XVII Зимней школы по механике сплошных сред, ИМСС УрО РАН, Пермь, февраль-март 2011, С. 137.
19. **Крутикова Е.В., Елфимова Е.А.**, Структурный фактор магнитных жидкостей. Моно- и бидисперсная модель, Тез. докл. XLIV Зимняя Школа ПИЯФ РАН, ФКС-2010, 2010, Р. 59.
20. **Крутикова Е.В., Елфимова Е.А.**, Исследование структурных свойств бидисперсной магнитной жидкости //XLV Зимняя Школа ПИЯФ РАН, Гатчина Секция Физики Конденсированного состояния, ФКС-2011, С. 112.
21. **Пьянзина Е.С., Канторович С.С.**, Структурный фактор феррожидкостей: комплексное исследование Изд-во СтавГУ, 2-ая Всероссийская научная конференция «Физико-химические и прикладные проблемы магнитных дисперсных наносистем», СтавГУ, Ставрополь, сентябрь, 2009, С. 314-318.
22. **Перевалова Т.В., Ряшко Л.Б., Федотов С.П.**, Индуцированный шумом транспорт аттракторов стохастических систем. Материалы конференции «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ». Екатеринбург, изд-во Уральского университета, 2010, С. 62-66.
23. **Перевалова Т.В., Ряшко Л.Б., Федотов С.П.**, Индуцированный шумом транспорт аттракторов стохастических систем // Материалы конференции Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ. Екатеринбург, изд-во Уральского университета, 2010, с. 62-66.
24. **Прокопьева Т., Канторович С.С., Вебер Р., Клингит М., Хольм К.**, Магнитные свойства системы наночастиц с магнитным моментом, смещенным относительно центра масс // Сб. научных трудов 17-ой зимней школы по механике сплошных сред, ИМСС УрО РАН, Пермь, 2011, С. 265.
25. **Ряшко Л.Б.**, Стабилизация инвариантных многообразий нелинейных стохастических систем. Тезисы докладов Международной конференции «Актуальные проблемы теории устойчивости и управления», Екатеринбург, 21-26 сентября 2009, С.124.

26. **Ряшко Л.Б.** Спектральный критерий стохастической устойчивости и методы стабилизации нелинейных колебательных режимов. Тез. докладов XI международной конференции «Устойчивость и колебания нелинейных систем управления», Москва ИПУ РАН, 2010, С.346-347.

27. **Цветков И.Н.**, Обратные стохастические бифуркации в многомерных дискретных моделях // Тезисы 42-й Всероссийской молодежной школы-конференции «Современные проблемы математики», Екатеринбург, 2011, с. 116-118.

Доклады на международных конференциях и семинарах:

1. **Alexandrov D.V., Malygin A.P., Alexandrova I.V.**, Morphological instability of the solid-liquid interface during directional solidification of binary mixtures with a mushy layer: the case of channel formation // Book of Abstracts “The 21th International Symposium on Transport Phenomena”, Kaohsiung City, Taiwan, 2-5 November 2010, P. 218.

2. **Bashkirtseva I.**, Noise-induced transitions for coexisting periodic attractors, Book of abstracts 4th International Scientific Conference on Physics and Control, Sept. 1-4, 2009, University of Catania, Italy, P.40.

3. Bossis G., Lopez-Lopez M.T., Gomez-Ramirez A., **Zubarev A.**, Inversion of Magnetic Forces in Strongly Bidisperse Magnetic Fluids, Euromech Colloquium 526 “Pattern in Soft Magnetic Matters”, Dresden, 21st-23rd March 2011. P. 43-44.

4. Cerda J., Ballenegger V., **Elfimova E., Krutikova E.**, Ivanov E., Holm C. Study of the structure factor anisotropy and long range correlations of ferrofluids in the diluted low coupling regime // Proceedings of ICMF12, 2010.- P. 226-227.

5. **Chirikov D., Zubarev A.**, Viscoelastic properties of ferrofluids, 7th Annual European Rheology Conference. Суздаль, 2011.

6. **Danilov V., Prokopieva T., Kantorovich S.**, Holm C., The influence of particle size distribution on the groundstate structures in ferrofluid monolayers, Тез. докл DPG Spring Meeting Регенсбург, Германия, 2010, CPP 36.20.

7. **Elfimova E., Krutikova E., Ivanov A.**, Isothermal compressibility of ferrofluids // Тез. докл. 5th International Conference Physics of Liquid Matter: Modern Problems, Kyiv, Ukraine, 2010, P. 309.
8. **Elfimova E., Ivanov A.**, Camp P. Pair correlations in a magnetic fluid with weak dipolar interactions // Proceedings of ICMF12, 2010.- P. 215-216.
9. **Elfimova E.A.**, Pshenichnikov A.F. Influence of interparticle interactions on diffusion processes in magnetic fluids // Proceedings of ICMF12, 2010.- P. 241-242.
10. **Elfimova E., Efimova V., Ivanov A.** Determination of the most probable magnetic moment orientations of a pair of dipolar hard spheres // Abstr. Moscow International Symposium on Magnetism, Москва, МГУ, август 2011.
11. **Elfimova E., Ivanov A.**, Magnetostatic properties of dense ferrocolloids // Proceedings of «8 Liquid Matter Conference», Австрия, Вена, 6-10 сентября 2011.
12. **Elfimova E., Ivanov A.** Influence of interparticle correlations on the thermodynamic properties of concentrated ferrocolloids // Proceedings of «8 Liquid Matter Conference», Австрия, Вена 6-10 сентября 2011.
13. **Elfimova E., Ivanov A., Turysheva E.**, The influence of interparticle correlations on initial magnetic susceptibility of a ferrofluid // Abstr. Moscow International Symposium on Magnetism, Москва, МГУ, август 2011.
14. **Elfimova E.**, Korolev V., Korolev D., Titova E., Heat capacity of a magnetic fluid: theory and experiment // Abstr. Moscow International Symposium on Magnetism, Москва, МГУ, август 2011.
15. Epifanov Y., **Elfimova E., Ivanov A.**, Cebo T., Camp P. Thermodynamic properties of concentrated magnetic fluids // Proceedings of ICMF12, 2010.- P. 130-131.
16. **Ivanov A.O., Kuznetsova O.B.**, Subbotin I.M., Magnetic properties of ferrofluid emulsions: Model of non-interacting droplets // Abstr. Euromech Colloquim 526 «Petterns in Soft Magnetic Matter», Dresden, March 2011, P. 21-22.

17. **Ivanov A.O., Kuznetsova O.B.**, Subbotin I.M., Dikanskii Yu.I., Magnetic properties of ferrofluid emulsions // Abstr. Moscow International Symposium on Magnetism, Москва, МГУ, август 2011.
18. **Kantorovich S., Danilov V., Prokopyeva T.**, Holm C. Ground state structures in ferrofluid monolayers: Theory and Simulations. // Тез. докл. DPG Spring Meeting – 2009, TU Dresden, Дрезден, Германия, октябрь, 2009, CPP 20.3.
19. Lakhtina E., **Elfimova E., Epifanov Yu.**, Spatial ferroparticle distribution in a magnetic fluid under strong gravitational field // Abstr. Moscow International Symposium on Magnetism, Москва, МГУ, август 2011.
20. Lee D., **Alexandrov D.V.**, Huang H.-N., Direct numerical simulation of a practical Stefan problem with a mushy-layer // Book of Abstracts “The 21th International Symposium on Transport Phenomena”, Kaohsiung City, Taiwan, 2-5 November 2010, P. 212.
21. **Minina E., Dobroserdova A.**, Cerda J., **Kantorovich S.**, Holm C., Bidisperse monolayers: what changes in 2D. // DPG Spring Meeting 2011, Технический университет г. Дрезден, Дрезден, Германия, 2011, CPP 38.35.
22. **Perevalova T., Ryashko L.**, Stochastic attractors and bifurcations in nonlinear dynamic systems // Thesis of conference reports «Dynamical Systems Modelling and Stability Investigation», Kyiv, May 24-27, 2011. P.113.
23. **Prokopieva T., Danilov V., Kantorovich S.**, Holm C., Ground state structures in ferrofluid monolayers: influence of an external magnetic field, Тез. докл DPG Spring Meeting Регенсбург, Германия, 2010, CPP 41.10.
24. **Prokopieva T., Danilov V., Kantorovich S.**, Holm C., Ground states of ferrofluid monolayers in the presence of an external magnetic field // DPG Spring Meeting 2011, Технический университет г. Дрезден, Дрезден, Германия, 2011, CPP 45.3.

25. **Pyanzina E., Kantorovich S.,** Cerda J., Holm C., Structure factor of the ferrofluid with chain aggregates. Тез. докл. DPG Spring Meeting – 2009, TU Dresden, Дрезден, Германия, октябрь, 2009, CPP 12.11.

26. **Pyanzina E.S.,** Structure factor of ferrfluids with chain aggregates // Тез. докл. 5th International Conference Physics of Liquid Matter: Modern Problems, Kyiv, Ukraine, 2010, P. 317.

27. **Pyanzina E., Kantorovich S.,** Cerda J., Holm C., Structure factor of the ferrofluid with chain aggregates: influence of an external magnetic field, Тез. докл DPG Spring Meeting Регенсбург, Германия, 2010, , University of Regensburg, CPP 36.19.

28. **Pyanzina E.,** Cerda J., **Kantorovich S.,** Holm C., Influence of an external magnetic field on a ferrofluid with chain aggregates // DPG Spring Meeting 2011, Технический университет г. Дрезден, Дрезден, Германия, 2011, CPP 38.36.

29. **Rozhkov D., Kantorovich S.,** Sega M., Like-charge attraction in confined colloidal systems // DPG Spring Meeting 2011, Технический университет г. Дрезден, Дрезден, Германия, 2011, CPP 38.21.

30. **Ryashko L., Bashkirtseva I.** Stochastic sensitivity function technique for analysis of the noise-induced phenomena in the population dynamics. Book of abstracts the 3rd Conference of Computational and Mathematical Population Dynamics, Bordeaux, France, 2010, p. 207.

31. Weeber R., **Kantorovich S.,** Cerda J., Holm C., Ferrofluids With Shifted Dipoles, Тез. докл DPG Spring Meeting Регенсбург, Германия, 2010, CPP 41.11.

32. **Zubarev A., Chirikov D.,** Statistical theory of viscoelastic phenomena in Magnetic Liquids, Gesellschaft fur Angewante Mathematik und Mechanik (GAMM), Karlsruhe, Germany, 22-26.03.2010.

33. **Zubarev A.Yu., Iskakova L. Yu.,** Phase transitions in dipole fluids, Abstract, Middle European Conference on Statistical Physics MECO-33, Mainz, France, 16-20.03.2010.

34. **Zubarev A.Yu.** “Rheology of highly concentrated suspensions”. Abstr. International Workshop on rheology of suspensions and colloids. University Nice-Sophia Antipolice, Nice, France, 7-10 September 2010.- P.16

Диссертации, защищенные и представленные к защите в рамках настоящего проекта:

1. **Низовцева И.Г.**, Математическое моделирование нестационарных процессов направленного затвердевания при наличии двухфазной зоны, Автореферат диссертации на соискание ученой степени **кандидата** физико-математических наук, Изд-во УрГУ, Екатеринбург, 2009, 20 с. Дата защиты 12 ноября 2009 г., диссертационный совет Д 212.286.01 при ГОУ ВПО «Уральский государственный университет им. А.М. Горького».

2. **Пермикин Д.В.**, Моделирование процессов диффузии при наличии фронтальных химических реакций, Автореферат диссертации на соискание ученой степени **кандидата** физико-математических наук, Изд-во УрГУ, Екатеринбург, 2009, 20 с. Дата защиты 24 декабря 2009 г., диссертационный совет Д 212.286.12 при ГОУ ВПО «Уральский государственный университет им. А.М. Горького».

3. **Цветков И.Н.**, Анализ стохастических аттракторов дискретных динамических систем, Автореферат диссертации на соискание ученой степени **кандидата** физико-математических наук, Изд-во УрГУ, Екатеринбург, 2010, 24 с. Дата защиты 17 февраля 2010 г., диссертационный совет Д 212.286.10 при ГОУ ВПО «Уральский государственный университет им. А.М. Горького».

4. **Крутикова Е.В.**, Термодинамические и структурные свойства ферроколлоидов, Автореферат диссертации на соискание ученой степени **кандидата** физико-математических наук, Изд-во УрГУ, Екатеринбург, 2010, 20 с. Дата защиты 26 февраля 2010 г., диссертационный совет Д 212.286.12 при ГОУ ВПО «Уральский государственный университет им. А.М. Горького».

5. **Иванов А.А.**, Нелинейный тепломассоперенос при затвердевании многокомпонентных растворов и расплавов, Автореферат диссертации на соискание ученой степени **кандидата** физико-математических наук, Изд-во УрГУ, Екатеринбург, 2010, 20 с. Дата защиты 10 июня

2010 г., диссертационный совет Д 212.286.01 при ГОУ ВПО «Уральский государственный университет им. А.М. Горького».

6. **Мартюшев Л.М.**, Производство энтропии и морфологические переходы при неравновесных процессах, Автореферат диссертации на соискание ученой степени **доктора** физико-математических наук, Изд-во УрФУ, Екатеринбург, 2010, 32 с. Дата защиты 17 декабря 2010 г., диссертационный совет Д 212.285.02 при ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого президента России Б.Н. Ельцина».

7. **Перевалова Т.В.**, Математическое моделирование и анализ аттракторов и бифуркаций нелинейных стохастических систем, Автореферат диссертации на соискание ученой степени **кандидата** физико-математических наук, Изд-во УрГУ, Екатеринбург. 2011, 20 с. Дата защиты 16 марта 2011 г., диссертационный совет Д 212.286.10 при ГОУ ВПО «Уральский государственный университет им. А.М. Горького».

8. **Пьянзина Е.С.**, Микроструктура и магнитные свойства бидисперсных феррожидкостей с цепочечными агрегатами, диссертация на соискание ученой степени **кандидата** физико-математических наук, Дата представления к защите 17 июня 2011 г., выписка из протокола № 20 объединенного заседания кафедры магнетизма и магнитных наноматериалов и кафедры математической физики Центра классического образования Уральского федерального университета им. первого президента России Б.Н. Ельцина, диссертационный совет Д 212.286.10.

Список работ, направленных в печать

1. **Чириков Д.Н.**, Реологические свойства полидисперсных феррожидкостей с цепочечными агрегатами // Коллоидный журнал (представлена к печати).

2. Pshenichnikov A.F., **Elfimova E.A.**, **Ivanov A.O.**, Magnetophoresis, sedimentation and diffusion of particles in concentrated magnetic fluids // J. Chem Phys (представлена к печати).

3. **Иванов А.А.**, **Малыгин А.П.**, Нелинейные эффекты при направленной кристаллизации трехкомпонентных расплавов с образованием двухфазных зон // Расплавы (представлена к печати).

4. **Малыгин А.П., Александров Д.В.**, Задача Стефана об испарении летучего компонента в системе газ-расплав-твердое тело // Расплавы (представлена к печати).
5. **Ivanov A.O., Kuznetsova O.B., Dikanskii Yu.I.** Nonmonotonic field dependence of the magnetic permeability of a paramagnetic suspension // Physical Review Letters (представлена к печати).
6. **Ivanov A.O., Kuznetsova O.B., Subbotin I.M.** Magnetic properties of ferrofluid emulsions: model of non-interacting droplets // Magnetohydrodynamics (представлена к печати).
7. **Ryashko L., Bashkirtseva I.** Analysis of excitability for FitzHugh-Nagumo model via a stochastic sensitivity function technique // Phys. Rev.E. 2011 (принята к печати).
8. **Башкирцева. И.А., Ряшко Л.Б., Федотов С.П., Цветков И.Н.** Обратные стохастические бифуркации в системе Эно // Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика 2011 (принята к печати).
9. **Ryashko L., Bashkirtseva I.** Control of Equilibria for Nonlinear Stochastic Discrete-Time Systems // IEEE Trans. on Autom. Control. 2011 (принята к печати).
10. **Александров Д.В., Малыгин А.П., Низовцева И.Г.**, Влияние ложного дна на нелинейную динамику процесса замерзания морской воды // Вестник СамГТУ (представлена к печати).
11. **Пермикин Д.В., Зверев В.С.** // Поверхностная реакционная диффузия возгоняющихся веществ // Вычислительная механика сплошных сред (представлена к печати).
12. **Иванов А.О., Пермикин Д.В.** Напыление литиевых пленок в вакууме // Теоретические основы химической технологии (представлена к печати)..
13. **Крутикова Е.В., Елфимова Е.А.**, Структурный фактор рассеяния полидисперсных магнитных жидкостей// Письма в ЭЧАЯ, 2011 (представлена к печати).

14. Laura Rodríguez-Arco, Modesto T. López-López, Juan D.G. Durán, **Andrey Zubarev, Dmitriy Chirikov**, Stability and magnetorheological behavior of magnetic fluids based on ionic liquids, J/Physics: Condensed Matters, (представлена к печати).
15. **Ryashko L., Bashkirtseva I.**, Sensitivity analysis of stochastic attractors and noise-induced transitions for population model with an Allee effect // CHAOS, 2011 (представлена к печати).
16. **Прокопьева Т.А., Данилов В.А., Канторович С.С.**, Микроструктура основного состояния тонкого слоя магнитной жидкости // ЖЭТФ, 2011 (принята в печать).
17. **Пьянзина Е.С., Канторович С.С.**, Структурный фактор феррожидкостей с цепочечными агрегатами: влияние внешнего магнитного поля // Письма в ЭЧАЯ, 2011 (представлена к печати).

Учебные пособия по результатам выполнения НИР:

1. **Ряшко Л.Б., Башкирцева И.А.**, Регулярная и стохастическая динамика нелинейных систем, Изд-во Урал. Ун-та, Екатеринбург, 2009, 72 с.
2. **Башкирцева И.А., Ряшко Л.Б.**, Компьютерное моделирование популяционной динамики, Изд-во Урал. Ун-та, Екатеринбург, 2009, 92 с.
3. **Вшивков С.А., Зубарев А.Ю., Сафронов А.П.** «Самоорганизация, фазовые переходы и свойства анизотропных сред в магнитном и механическом полях» // Монография. Уральский федеральный университет. Екатеринбург, 2011.

Жирным шрифтом выделены члены научного коллектива.

Все индикаторы и показатели проекта выполнены в полном объеме.

Список использованных источников

1. Taylor G.I. // Phil. Trans. Roy. Soc. A, 1923.- Vol. 223.- P. 289.
2. Mullins W.W., Sekerka R.F. // J. Appl. Phys., 1964.- Vol. 35.- P. 444.
3. Lin C.C. The Theory of Hydrodynamic Stability.- Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1955.
4. Иванцов Г.П. // Доклады АН, 1951.- Т. 81.- С. 179.
5. Sekerka R.F. In Crystal Growth: An Introduction, ed. by P. Hartman, North Holland, Amsterdam, 1973.- P. 403.
6. Hills R.N., Loper D.E., Roberts P.H. // Q. J. Appl. Maths., 1983.- Vol. 36.- P. 505.
7. Worster M.G. // J. Fluid Mech., 1986.- Vol. 167.- P. 481.
8. Wollkind D.J., Segel L.A. // Philos. Trans. Roy. Soc., Ser. A, 1970.- Vol. 268.- P. 351.
9. Борисов В.Т. Теория двухфазной зоны металлического слитка.- М.: Металлургия, 1987.
10. Вабищевич П.Н., Мансуров В.В., Чурбанов А.Г. // Хим. пром., 1994.- Т. 10.- С. 39.
11. Alexandrov D.V., Churbanov A.G., Vabishchevich P.N. // Int. J. Fluid Mech. Res., 1999, Vol. 26, P. 248.
12. Buyevich Yu.A., Alexandrov D.V., Mansurov V.V. Macrokinetics of Crystallization.- New York: Begell House, 2001.
13. Александров Д.В., Малыгин А.П. // Доклады АН, 2006.- Т. 411.- С. 390.
14. Alexandrov D.V., Malygin A.P., Alexandrova I.V. // Ann. Glaciol., 2006.- Vol. 44.- P. 118.
15. Wettlaufer J.S., Worster M.G., Huppert H.E. // Geophys. Res. Lett., 1997.- Vol. 24.- P. 1251.
16. Wettlaufer J.S., Worster M.G., Huppert H.E. // J. Fluid Mech., 1997.- Vol. 344.- P. 291.
17. Schulze T.P., Worster M.G. // J. Fluid Mech., 1999.- Vol. 388.- P. 197.
18. Bergman M.I. et al. // Metall. Trans. A, 1997.- Vol. 28.- P. 859.
19. Feltham D.L., Worster M.G., Wettlaufer J.S. // J. Geophys. Res., 2002.- Vol. 107.- art. no. 3009.
20. Feltham D.L., Worster M.G. // J. Fluid Mech., 1999.- Vol. 391.- P. 337.
21. Hellawell A., Sarazin J.R., Steube R.S. // Phil. Trans. Roy. Soc. A, 1993.- Vol. 345.- P. 507.
22. Tait S., Jaupart C. // J. Geophys. Res., 1992.- Vol. 97.- P. 6735.
23. Bergman M.I., Fearn D.R. // Geophys. Res. Lett., 1994.- Vol. 21.- P. 477.
24. Batchelor G.K. // Ann. Rev. Fluid Mech., 1974.- Vol. 6.- P. 227.

25. Полубаринова-Кочина П.Я. Теория движения грунтовых вод.- М.: Наука, 1977.
26. Ono N., Kasai T. // Ann. Claciol., 1980.- Vol. 6.- P. 298.
27. Martin S., Kauffman P. // J. Fluid Mech., 1974.- Vol. 64.- P. 507.
28. Wettlaufer J.S., Worster M.G., Huppert H.E. // J. Geophys. Res., 2000.- Vol. 105.- P. 1123.
29. Alexandrov D.V., Ivanov A.O. // J. Crystal Growth, 2000.- Vol. 210.- P. 797.
30. Розенцвейг Р. Феррогидродинамика, М.: Мир, 1989. 356с.
31. Odenbach S. // Magnetoviscous Effects in Ferrofluids. Lectures Notes in Physics / Ed. by Odenbach S. Berlin: Springer, 2002.
32. Zubarev A.Yu, Fleisher J., Odenbach S, Towards a theory of dynamical properties of polydisperse magnetic fluids: Effect of chain-like aggregates //Physica A., 2005.- V.358- P.475-491
33. Ilg P., Odenbach S. // In Colloidal Magnetic Fluids. Lectures Notes in Physics / Ed. by Odenbach S. New York: Springer, 2009. P. 249.
34. Fleischer J. // Rheologische Eigenschaften Magnetischer Flüssigkeiten Unterschiedlicher Chemischer Zusammensetzung / Berlin: Verlag, 2004.
35. Pop L. // Investigation of the microstructure of ferrofluids under the influence of a magnetic field and shear flow / Dresden: Verlag, 2006.
36. Zubarev A.Yu., Iskakova L.Yu. Rheological Properties of Magnetic Suspensions// J.Phys.:Condens.Matter., 2008.- V.20- P.204138-204142
37. Pop L., Odenbach S. Investigation of the microscopic reason for the magnetoviscous effect in ferrofluids studied by small angle neutron scattering // J.Phys.:Condens.Matter. 2006. - Vol.8.- S2785-S2802 *Пшеничников А. Ф., Шурубор И. Ю.* Изв. АН СССР, сер. физич. 1987. Т. 51. С. 1081.
38. Teixeira P.I.C., Tavares J.M., Telo da Gama M.M., The effect of dipolar forces on the structure and thermodynamics of classical fluids //J. Phys.: Condens. Matters, 2000.- V. 12.- P.R411-R428
39. Islam M.F., Lin K.H., Lacoste D., Lubenski T.C., Yodh A.G., Field-induced structures in miscible ferrofluid suspensions with and without latex spheres//Phys.Rev.E., 2003.- Vol.67.- P.21402- 21410
40. Holm C., Weis J.J., The structure of ferrofluids: A status report //Cur. Opin.Colloid Interface Sci., 2005.- Vol.10- P.133-140
41. Pop L.M., Odenbach S., Wiedenmann A., Matoussevitch N., Bonnemann H.J. Viscosity of magnetic fluids // J. Magn. Magn. Mater., 2005.- Vol.-289.- P.303-306

42. Klokkenburg M., Dullens R.P.A., Kegel W.K., Erne B.H., Philipse A.P., Quantitative Real-Space Analysis of Self-Assembled Structures of Magnetic Dipolar Colloids// Phys. Rev. Lett., 2006.- Vol.- 96, 037203- 037207
43. Iskakova L.Yu., Zubarev A.Yu. Chain-like structures in polydisperse ferrofluids// Physica A. 2004. V. 335. P. 314–324.
44. А.Ю.Зубарев, Д.Н.Чириков К теории магнитовязких эффектов в феррожидкостях, ЖЭТФ, 2010.- Т. 137-С.1139-1150
45. Зубарев А.Ю., Исакова Л.Ю., Чириков Д.Н. К нелинейной реологии магнитных жидкостей // Коллоидный журнал. 2011. -Т. 73.- С. 1–14.
46. Chirikov D.N, Fedotov S.P., Iskakova L.Yu., Zubarev A.Yu. Viscoelastic properties of ferrofluids // Phys. Rev. E. 2010. -V. 82. -P. 051405.
47. Зубарев А.Ю., Чириков Д.Н. Вязкоупругие свойства феррожидкостей// Тез. докл. 14-ой Международной Плесской научной конференции по нанодисперсным магнитным жидкостям. ГОУ ВПО «Ивановский государственный университет им. В.И. Ленина», 2010. С. 82.
48. Bossis G.,Métyayer C.,Zubarev A., Analysis of chaining structures in colloidal suspensions subjected to an electric field //Phys.Rev.E., 2007.-V. 76.-P. 041401-041414
49. Zubarev A.Yu., Iskakova L.Yu.,Viscoelastic properties of magnetic liquids //Magnetohydrodynamics, 2004. - Vol. 40.-P.65-76.
50. Zubarev A.Yu., Iskakova L.Yu., Effect of chainlike aggregates on dynamical properties of magnetic liquids//Phys.Rev.E., 2000.- Vol.61.- P.5415-5421
51. Зубарев А.Ю., Исакова Л.Ю.. Теория физических свойств магнитных жидкостей с цепочечными агрегатами // ЖЭТФ. 1995. –Т.107.- С.1534-1551
52. Шлиомис М.И. Магнитные жидкости. //Усп.физ.наук. 1974- Т. 112- С.427-458
53. Марценюк М. А. Динамика магнитных жидкостей// Тез. Докл. III Всес. совещ. по физике магнитных жидкостей. Ставрополь, 1986. С. 73.
54. Martin J., Andreson R. Chain model of electrorheology // J. Chem. Phys. 1996.- V.104- P.4814-4828.
55. Halsey T., Martin J., Adolf D. Rheology of electrorheological fluids // Phys. Rev. Lett. 1992. - Vol.68. -P.1519-1522.
56. Shulman Z.P., Kordonsy V.I., Zaltsgendler E.A., Prokhorov I.V., Khusid B.M., Demchuk S.A. Structure, physical properties and dynamics of magnetorheological suspensions // Int. J. Multiph. Flow. 1986.- V.12. -P.935-955.

57. Bossis G., Volkova O., Lacis S., Meunier A. // *Magnetorheology: Fluids, Structures and Rheology*, in: Odenbach S. (Ed) *Ferrofluids. Magnetically controllable fluids and their applications. Lecture Notes in Physics*; 594; Springer-Verlag. 2002. –P.202-230.
58. Batchelor G.K., The effect of Brownian motion on the bulk stress in a suspension of spherical particles // *J. Fluid Mechanics*, 1977. - Vol.83.- P.97-117
59. Покровский В.Н. Статистическая гидромеханика разбавленных суспензий. М.: Наука, 1978. 13с.
60. Borin D., Zubarev A., Chirikov D., Müller R., Odenbach S. Ferrofluid with clustered iron nanoparticles: Slow relaxation of rheological properties under joint action of shear flow and magnetic field // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2011. – Vol. 323, № 10. – P. 1273–1277.
61. Dutz S., Andrä W., Hergt R., Müller R., Oestreich C., Schmidt C., Töpfer J., Zeisberger M., Bellemann M. Influence of dextran coating on the magnetic behaviour of iron oxide nanoparticles // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2007. – Vol. 311, № 1. – P. 51–54.
62. Tunan F., Tiu C. Steady-shear viscosity and transient stress response for elasto-thixotropic fluids // *Acta Mech. Sinica* – 1991. – Vol. 7, № 1. – P. 46–50.
63. Říha P. The unified description of viscoelastic and thixotropic properties of human blood // *Rheol. Acta* – 1982. – Vol. 21, № 4–5. – P. 650–652
64. Zubarev A. Yu., Iskakova L. Yu. On the theory of rheological properties of magnetic suspensions // *Physica A.* – 2007. – Vol. 382, № 2. – P. 378–388.
65. Lomba E., Lado F., Weis J.J., Structure and thermodynamics of a ferrofluid monolayer // *Phys. Rev. E*, 2000.- Vol. 61.- P. 3838-3849.
66. Camp P.J., Patey G.N. Structure and scattering in colloidal ferrofluids // *Phys. Rev. E*, 2000.- Vol. 62.- P. 5403-5408.
67. Wang Z., Holm C. Structure and magnetic properties of polydisperse ferrofluids: A molecular dynamics study // *Phys. Rev. E*, 2003.- Vol. 68.- P. 041401-1--11.
68. Huang J.P., Wang Z. W., Holm C. Computer simulations of the structure of colloidal ferrofluids // *Phys. Rev. E*, 2005.- Vol. 71.- P. 061203-1--1.
69. Kristóf T., Szalai I. Magnetic properties in monolayers of a model polydisperse ferrofluid // *Phys. Rev. E*. 2005.- Vol. 72.- P. 041105-1--9.
70. Odenbach S. *Magnetoviscous Effects in ferrofluids. Lecture Notes in Physics.*- New York, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2002.- Vol. 71.- P.151.
71. Shen L., Stachowiak A., Fateen S.K., Laibinis P.E., Hatton T.A. Structure of Alkanoic Acid Stabilized Magnetic Fluids. A Small-Angle Neutron and Light Scattering Analysis // *Langmuir*, 2001.- Vol. 17.- P. 288-299.

72. Klokkenburg M., Dullens R., Kegel W., Ern  B., Philipse A. Quantitative Real-Space Analysis of Self-Assembled Structures of Magnetic Dipolar Colloids // *Phys. Rev. Lett.*, 2006.- Vol. 96.- P. 037203-1--4.;
73. Gazeau F., Dubois E., Bacri J.C., Boue F., Cebers A., Perzynski R. Anisotropy of the structure factor of magnetic fluids under a field probed by small-angle neutron scattering // *Phys. Rev. E*, 2002.-Vol. 65.- P. 031403-1--15.
74. Dubois E., Perzynski R., Boue F., Cabuil V. Liquid–Gas Transitions in Charged Colloidal Dispersions: Small-Angle Neutron Scattering Coupled with Phase Diagrams of Magnetic Fluids // *Langmuir*, 2000.- Vol. 16.- P. 5617-5625.
75. Lal J., Abernathy D., L. Auvray, Diat O., Gr bel G. Dynamics and correlations in magnetic colloidal systems studied by X-ray photon correlation spectroscopy // *Eur. Phys. J. E*, 2001.- Vol. 4.- P. 263-271.
76. Pop L.M., Odenbach S. Investigation of the microscopic reason for the magnetoviscous effect in ferrofluids studied by small angle neutron scattering // *J. Phys.: Condens. Matter.*, 2006.- Vol. 18.- P. S2785- S2802.
77. Klokkenburg M., Ern  B.H., Wiedenmann A., Petukhov A.V., Philipse A.P. Dipolar structures in magnetite ferrofluids studied with small-angle neutron scattering with and without applied magnetic field // *Phys. Rev. E*, 2007.- Vol. 75.- P. 051408-1--9.
78. Pyanzina E., Kantorovich S., Cerd  J.J., Ivanov A., Holm C. How to analyse the structure factor in ferrofluids with strong magnetic interactions: a combined analytic and simulation approach // *Mol. Phys.*, 2009.- Vol. 107.- P. 571-590.
79. Wertheim M.S. Exact Solution of the Mean Spherical Model for Fluids of Hard Spheres with Permanent Electric Dipole Moments // *J. Chem. Phys.*, 1971.- Vol. 55. No. 9.-P. 4291.
80. Morozov K.I., Lebedev A.V. The effect of magneto-dipole interactions on the magnetization curves of ferrocolloids // *J. Magn. Magn. Matt.*, 1990. - Vol. 85, No. 1-3.-P. 51-53.
81. Wagner J., Fischer B. and Autenrieth T. Field induced anisotropy of charged magnetic colloids: A rescaled mean spherical approximation study // *J. Chem. Phys.*, 2006.-Vol.124, - P.114901.
82. Szalai I. and Dietrich S. Magnetization and susceptibility of ferrofluids // *J. Phys.: Condens. Matter.*, 2008.- Vol. 20, - P.204122.
83. Pshenichnikov A.F., Mekhonoshin V.V., Lebedev A.V. Magneto-granulometric analysis of concentrated ferrocolloids. // *J. Magn. Magn. Matt.*, 1996.- Vol. 161, - P. 94-102.
84. Ivanov A.O., Kuznetsova O.B. Magnetogranulometric analysis of ferrocolloids: modified mean-field model of the second order // *Colloid Journal*, 2006.- Vol. 68, No. 4, -P. 430-440.

85. Ivanov A.O., Kuznetsova O.B. Magnetic properties of dense ferrofluids: an influence of interparticle correlations // *Phys. Rev. E*, 2001.- Vol. 64, No. 4, -P. 041405-01-12.;
86. Buyevich Yu.A., Ivanov A.O. Equilibrium properties of ferrocolloids // *Phys. A*, 1992.- Vol. 190, No. 3-4, -P. 276-294.
87. Pshenichnikov A.F., Lebedev A.V. Low-temperature susceptibility of concentrated magnetic fluids // *J. Chem. Phys.*, -2004.- Vol. 121.- P. 5455-5467.
88. Ivanov A.O., Kantorovich S.S., Reznikov E.N., Holm C., Pshenichnikov A.F., Lebedev A.V., Chremos A., Camp P.J. Magnetic properties of polydisperse ferrofluids: A critical comparison between experiment. theory, and computer simulation // *Phys. Rev. E*, 2007.- Vol. 75, No. 6, -P. 061405-1 - 061405-12.]
89. Шлиомис М. И. Магнитные жидкости // *УФН*, 1974. - Т. 112, Вып.3. - С. 427-458.
90. Joslin C.G. The third dielectric and pressure virial coefficients of dipolar hard sphere fluids // *Molecular Phys.*, 1981.- Vol.42, -P. 1507-1518.
91. Morozov K. I. Gradient diffusion in concentrated ferrocolloids under the influence of a magnetic field // *Phys. Rev. E*, 1996.- Vol.53,- P. 3841-3846.
92. Elfimova E.A., Ivanov A.O. Pair correlations in magnetic nanodispersed fluids // *J. Exp. Theor. Phys.*, 2010.- Vol. 111.- P. 146-156.
93. Chaikin P.M., Lubensky T.C., *Principles of Condensed Matter Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
94. Arnold L. *Random dynamical systems*. - Springer, 1998. - 585 p.
95. Arnold L., Bleckert G., Schenk-Hoppe K. *The stochastic Brusselator: parametric noise destroys Hopf bifurcation. Stochastic dynamics*. - New-York: Springer, 1999. -71p.
96. Arnold L., Boxler P. Stochastic bifurcation: Instructive examples in dimension one // in: Mark Pinsky and Volker Wihstutz, editors, *Diffusion processes and related problems in analysis. Vol. II: Stochastic flows. Progress in Probability*. Boston Basel Stuuugart. Birkhaeuser, 1992. - Vol. 27. - P. 241-255.
97. Arnold L., Horsthemke W., Lefever R. White and colored external noise and transition phenomena in nonlinear systems // *Zs. Phys*, 1978. - Vol. 29. – P. 367-373.
98. Crauel H., Imkeller P., Steinkamp M. Bifurcation of one-dimensional stochastic differential equations. // in H. Crauel and M. Gundlach, editors, *Stochastic dynamics*. Springer-Verlag. New York, 1999. - P. 27-47.
99. Crauel H., Flandoli F. Additive Noise Destroys a Pitchfork Bifurcation // *Journal of Dynamics and Differential Equations*, 1998. -Vol. 10. 2. - P. 259-274.
100. Fronzoni L., Mannella R., McClintock P., Moss P. Postponement of Hopf bifurcations by multiplicative colored noise // *Phys. Rev. A*, 1987. - Vol. 36. - P. 834-841.

101. Lefever R., Turner J. Sensitivity of a Hopf bifurcation to external multiplicative noise // In W. Horsthemke D.K.Kondepudi, editors. Fluctuations and sensitivity in nonequilibrium systems. Springer-Verlag. Berlin, 1984. - P. 143-149.
102. Lefever R., Turner J. Sensitivity of a Hopf bifurcation to multiplicative colored noise // Phys. Rev. Lett, 1986. - Vol. 56. - P. 1631-1634.
103. Malick K., Marcq P. Stability analysis of noise-induced Hopf bifurcation // Eur. Phhys. J.B., 2003. - Vol. 36. - P. 119-128.
104. Namachchivaya N. Stochastic bifurcation // Applied Mathematics and Computation, 1990.- Vol. 38. Issue 2. - P. 101-159.
105. Xu B., Lai.Y.-C., Zhy L., Do Y. Experimental Characterization of Tranzition to Chaos in the Presence of Noise // Phys. Rev. Lett, 2003. - Vol. 90. - P. 164101(1-4).
106. Moss F., McClintock P.V.E. Noise in nonlinear dynamical systems. - Cambridge University Press. 1989. - 223p.
107. Хорстхемке В., Лефевр Р. Индуцированные шумом переходы. - М.: Мир, 1987. - 398 с.
108. Landa P.S., McClintock P.V.E. Changes in the dynamical behavior of nonlinear systems induced by noise // Physics Reports, 2000. - Vol. 323. - P. 1-80.
109. Вадивасова Т.Е., Анищенко В.С. Стохастические бифуркации // Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика. Саратов, 2009. - № 6. - С. 37-50.
110. Bashkirtseva I. A., Ryashko L. B. Sensitivity analysis of the stochastically and periodically forced Brusselator // Physica A. 2000.- Vol. 278.- P. 126-139.
111. Bashkitseva I. A., Ryashko L. B. Sensitivity analysis of stochastically forced Lorenz model cycles under period-doubling bifurcations // Dynamic Systems and Applications, 2002.- Vol. 11.- P. 293-310.
112. Ryagin M., Ryashko L. The analysis of the stochastically forced periodic attractors for Chua's circuit // Int. J. Bifurcation Chaos, 2004.- Vol. 14.- P. 3981-3987.
113. Bashkirtseva I.A., Ryashko L.B. Sensitivity and chaos control for the forced nonlinear oscillations // Chaos, Solitons and Fractals, 2005.- Vol. 26.- P. 1437-1451.
114. Bashkirtseva I., Ryashko L., Tsvetkov I. Sensitivity Analysis of Stochastic Equilibria and Cycles for the Discrete Dynamic Systems // Dynamics of Continuous, Discrete and Impulsive Systems. Series A: Mathematical Analysis, 2010.- Vol. 17.- P. 501-515.
115. Bashkirtseva I., Ryashko L., Stikhin P. Noice-induced backward bifurcations of stochastic 3D-cycles // Fluctuation and Noise Letters, 2010.- Vol. 9.- N 1.- P. 89-106.

116. Башкирцева И.А., Ряшко Л.Б., Федотов С.В., Цветков И.Н. Обратные стохастические бифуркации циклов дискретных систем // Нелинейная динамика, 2010.- Т. 6, №4.- С. 737-753.

Приложения

Приложение 1

Расчетные параметры системы, использованные в разделе 1.

$$K_0 = \frac{1}{\rho}$$

$$K_1 = \frac{(k^2 - 1) \cos k\varphi}{\rho}$$

$$K_2 = \frac{1}{\rho^2} \left[\frac{k^2}{2} + \left(1 - \frac{5}{2} k^2 \right) \cos^2 k\varphi \right]$$

$$K_3 = \frac{1}{\rho^3} \left[\left(\frac{3}{2} k^4 + \frac{9}{2} k^2 - 1 \right) \cos^3 k\varphi - \frac{3}{2} k^2 (1 + k^2) \cos k\varphi \right]$$

$$A_2 = \{ 2A_1 \rho k (\alpha + \rho - 2\alpha k) z^2 + B_{00} (2\alpha + \rho + \alpha k^2) + 2A_1 \rho k (\alpha + \rho + 2\alpha k) \} / \{ 4\rho^2 (z^4 (2\alpha k - \rho) + (2\alpha k + \rho)) \}$$

$$A_{3,k} = \{ 8A_2 \rho^2 k (\alpha + \rho - \alpha k) z^4 + A_1 \rho k (3\rho k - 6\alpha - 3\rho + 5\alpha k) z^2 + 8A_2 \rho^2 k (\alpha + \rho + \alpha k) - A_1 \rho k (3\rho k + 6\alpha + 3\rho + 5\alpha k) + 8B_{20} \rho^2 (\alpha + \rho) + B_{00} (3\alpha k^2 - 6\alpha - 2\rho) + 3A_1 (5k^2 - k^4 - 2) \} \rho^{k-3} / \{ 8(z^2 (\alpha k - \rho) + (\alpha k + \rho)) \}$$
$$A_{3,3k} = \{ 24A_2 \rho^2 k (\alpha + \rho - 3\alpha k) z^4 + 3A_1 \rho k (\rho k - 2\alpha - \rho + 7\alpha k - 4\alpha k^2) z^2 + 24A_2 \rho^2 k (\alpha + \rho + 3\alpha k) - 3A_1 \rho k (\rho k + 2\alpha + \rho + 7\alpha k + 4\alpha k^2) + B_{00} (9\alpha k^2 + 6\alpha + 2\rho) + 3A_1 (9k + 3k^4 - 2) \} \rho^{3k-3} / \{ 24(z^6 (3\alpha k - \rho) + (3\alpha k + \rho)) \}$$

$$\begin{aligned}
M_1 = & -3 \alpha^4 k^7 - 6 \alpha^4 k^3 + 15 \alpha^4 k^5 + 18 g^4 k L - 10 g^5 k L + 12 \alpha g^3 k \\
& - 10 \alpha^2 g^3 k^3 - 3 \alpha g^3 k^3 - 13 g^4 L k^3 - 6 g^4 L^2 k^5 + 34 g^4 L^2 k^3 \\
& - 16 g^4 L^2 k - 7 g^4 k^3 \alpha - 4 g^4 k \alpha + 3 g^5 L k^3 - 6 g^4 k - 12 L \alpha^2 k^5 g^2 \\
& - 48 \alpha g^3 k L + 78 \alpha g^3 L k^3 - 4 \alpha g^3 L^2 k^5 + 4 \alpha g^3 L^2 k^3 - 4 \alpha g^3 L k^5 \\
& - 4 g^4 k^3 \alpha L + 8 g^4 k \alpha L + 8 L \alpha^2 k^3 g^2 - 24 k \alpha^2 g^2 + 2 \alpha^2 k^5 g^2 \\
& - 4 \alpha^3 k^5 g^2 + 50 \alpha^2 k^3 g^2 + 6 g^5 k - 12 L \alpha^3 k^7 g - 24 L \alpha^3 k^3 g \\
& + 60 L \alpha^3 k^5 g - 12 L^2 \alpha^2 k^3 g^2 - 6 L^2 \alpha^2 k^7 g^2 + 30 L^2 \alpha^2 k^5 g^2 \\
& + 4 \alpha^3 k^3 g - 4 \alpha^3 k^5 g
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
M_2 = & 6 g^5 L - 4 g^5 k^2 + 4 g^4 k^2 - 6 \alpha g^3 + 2 g^4 \alpha + 3 \alpha^4 k^7 + 6 \alpha^4 k^3 \\
& - 15 \alpha^4 k^5 - 2 g^5 + 2 g^4 + 7 g^4 k^2 \alpha - 14 g^4 k^2 \alpha L - 10 g^4 L \\
& - 15 \alpha^3 k^6 g + 2 \alpha^3 k^4 g^2 + 12 k^2 \alpha^2 g^2 - 24 \alpha^2 k^4 g^2 + 6 \alpha^2 g^3 k^2 \\
& - 5 \alpha g^3 k^2 + 4 \alpha g^3 k^4 - 2 g^4 L^2 k^4 + 2 g^4 L^2 k^2 + 3 g^4 L k^2 + 4 g^4 L k^4 \\
& - 30 L \alpha^2 k^6 g^2 + 144 k^4 \alpha^2 L g^2 - 60 L \alpha^2 k^2 g^2 - 2 \alpha^2 g^3 k^4 L \\
& + 69 \alpha g^3 L^2 k^4 - 30 \alpha g^3 L^2 k^2 + 34 \alpha g^3 L k^2 - 32 \alpha g^3 L k^4 \\
& - 15 \alpha g^3 L^2 k^6 + 6 g^4 k^4 \alpha L - g^5 L k^2 + 71 \alpha^3 k^4 g - 30 \alpha^3 k^2 g
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
M_3 = & 4 k (-6 k^2 \alpha^4 + 15 k^4 \alpha^4 + 6 g^2 \alpha^2 + 2 g^4 L^2 + g^5 L - 3 \alpha g^3 + 3 g^4 \alpha \\
& + 12 \alpha g^3 L - 4 g^4 L \alpha + 2 k^2 \alpha^3 g^2 - 3 k^6 \alpha^4 - 6 g^4 k^2 \alpha + 5 g^4 k^2 \alpha L \\
& + 2 k^2 \alpha^2 g^3 L - 6 k^6 L \alpha^3 g - 12 k^2 L \alpha^3 g + 30 k^4 L \alpha^3 g \\
& - 6 k^2 L^2 \alpha^2 g^2 - 3 k^6 L^2 \alpha^2 g^2 + 15 k^4 L^2 \alpha^2 g^2 - g^4 L - \alpha^3 k^4 g^2 \\
& - 14 k^2 \alpha^2 g^2 + 6 \alpha^2 k^4 g^2 - 3 \alpha^2 g^3 k^2 + 6 \alpha g^3 k^2 + 2 g^4 L^2 k^4 \\
& - 7 g^4 L^2 k^2 + 2 g^4 L k^2 - 17 k^4 \alpha^2 L g^2 + 6 L \alpha^2 k^2 g^2 + \alpha^2 g^3 k^4 L \\
& - 7 \alpha g^3 L^2 k^4 + 4 \alpha g^3 L^2 k^2 - 29 \alpha g^3 L k^2 + 8 \alpha g^3 L k^4 - 2 g^5 L k^2 \\
& - 8 \alpha^3 k^4 g + 2 \alpha^3 k^2 g)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
M_4 = & 2 g (4 g^4 k^2 + 2 \alpha g^3 - 4 g^3 k^2 - 10 g^3 L + 6 \alpha^3 k^2 - 15 \alpha^3 k^4 \\
& - 6 \alpha g^2 - 5 \alpha^3 k^6 - 2 g^4 + 2 g^3 + 15 k^2 \alpha g^2 + 23 g^3 k^2 L - 12 g^3 L^2 k^2 \\
& + 18 g^3 L^2 k^4 - 4 \alpha k^4 g^2 - 4 g^3 L k^4 - 10 L \alpha^2 k^6 g - 22 k^4 \alpha^2 L g \\
& + 12 L \alpha^2 k^2 g - 7 L^2 \alpha k^4 g^2 + 6 L^2 k^2 \alpha g^2 - 14 k^2 \alpha L g^2 \\
& + 32 L \alpha k^4 g^2 - 5 g^2 \alpha L^2 k^6 - 2 k^2 \alpha^2 g + 12 \alpha^2 k^4 g + 6 g^4 L \\
& - 10 k^2 \alpha^2 g^2 + 8 \alpha^2 k^4 g^2 - 5 \alpha g^3 k^2 - 13 g^4 L k^2 + 8 k^4 \alpha^2 L g^2 \\
& - 10 \alpha g^3 L k^2 + 6 \alpha g^3 L k^4 + 8 \alpha^3 k^4 g)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
M_5 = & 2k(-12k^2\alpha^4 + 30k^4\alpha^4 + 8g^4L^2 + 6g^5L - 8g^4\alpha - 6g^5 + 6g^4 \\
& + 8g^4L\alpha - 6k^6\alpha^4 - 17g^4k^2\alpha - 16g^4k^2\alpha L - 12k^6L\alpha^3g \\
& - 24k^2L\alpha^3g + 60k^4L\alpha^3g - 12k^2L^2\alpha^2g^2 - 6k^6L^2\alpha^2g^2 \\
& + 30k^4L^2\alpha^2g^2 - 14g^4L + 6k^2\alpha^2g^2 + 22\alpha^2k^4g^2 - 26\alpha^2g^3k^2 \\
& + 27\alpha g^3k^2 + 14g^4L^2k^4 - 22g^4L^2k^2 + 21g^4Lk^2 - 40k^4\alpha^2Lg^2 \\
& + 8L\alpha^2k^2g^2 + 4\alpha^2g^3k^4L - 16\alpha g^3L^2k^4 + 4\alpha g^3L^2k^2 \\
& - 26\alpha g^3Lk^2 + 36\alpha g^3Lk^4 - 11g^5Lk^2 - 20\alpha^3k^4g + 4\alpha^3k^2g)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
M_6 = & \alpha g^3 - g^4 + g^3 - 2\alpha g^2 + \alpha^2 k^2 g + \alpha g^3 k^2 - k^2 \alpha g^2 - 2\alpha^3 k^2 \\
& + 2\alpha^3 k^4 - 3g^3 L - \alpha g^3 L k^2 + 4L\alpha^2 k^4 g - 4L\alpha^2 k^2 g + 2Lk^2 \alpha g^2 \\
& + 2L^2 \alpha k^4 g^2 - 2L^2 k^2 \alpha g^2 + 2g^4 L
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
M_7 = & gk(-g^2 + g^3 + 3k^2\alpha^2 - 4\alpha^2 - 2\alpha g^2 - 2g^3L + 3\alpha g + 3k^2g^2L^2 \\
& - 3g^2L^2 + 3g^2L + g^2\alpha L + 6k^2gL\alpha - 8g\alpha L)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
M_8 = & 4g^4Lk^2 + 2\alpha g^3Lk^2 + 2\alpha^2k^2g - 8L\alpha^2k^2g - 4g^3Lk^2 - 2g^3 \\
& + 8Lk^2\alpha g^2 - 4g^4L - 8L\alpha k^4g^2 - 4\alpha^2k^4g + 6g^3L + 4L^2\alpha k^4g^2 \\
& - 4g^3L^2k^4 + 2g^4 - 4L^2k^2\alpha g^2 - 6k^2\alpha g^2 + 4\alpha^3k^4 - 4\alpha^3k^2 \\
& + 6\alpha g^3k^2 + 4\alpha^2k^2g^2 + 4\alpha g^2 + 8L\alpha^2k^4g + 4g^3L^2k^2 - 2\alpha g^3
\end{aligned}$$

Приложение 2

СПРАВКА

о не патентоспособности РИД
по Государственному контракту № 02.740.11.0202 от 07 июля 2009 г.,
«Структурно-фазовые превращения в механике гетерогенных и многофазных сред»,
этап 6

В соответствии с тематикой (этап 6 «Исследование направленных фазовых переходов в средах со сложной нелинейной реологией»), целью (этап 6 «Изучение нелинейной динамики различных процессов физико-химической механики, протекающих в гетерогенных и многофазных средах в сопровождении структурно-фазовых превращений в этих средах») и содержанием работ по государственному контракту № 02.740.11.0202 от 07 июля 2009 г. ожидаемыми результатами контракта являются:

1. Модель и методы ее теоретического решения для описания роста дендритов в переохлажденной бинарной системе при учете течений гетерогенной жидкости с ядрами новой фазы и процессов тепломассопереноса.
2. Модель и методы ее теоретического решения для описания нелинейной вязкоупругости в многокомпонентных гетерогенных средах.
3. Модель и методы ее теоретического решения, описывающие магнитные свойства сильно концентрированных магнитных нанодисперсных жидкостей.
4. Модель и методы ее теоретического решения, описывающие стохастические бифуркации изучаемых систем.
5. Методы стохастического анализа переходов между аттракторами, вызванных случайными возмущениями.
6. Методы исследования механизмов обратных стохастических бифуркаций.

На основании ст. 1349, п.п. 1.5., ст. 1350, п. 1 ст. 1351, п. 1. ст. 1352 части 4 Гражданского кодекса, введенного в действие 1 января 2008 г., ожидаемые результаты интеллектуальной деятельности контракта не являются объектами патентного права (не патентоспособны), в связи с чем, патентные исследования по данному контракту не проводились.

Главный специалист – патентовед ОНТИ УНИ



Н.П. Невраева

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2011615006

TernaryMeltCrystallization.mcd

Правообладатель(ли): *Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Уральский государственный университет им. А.М.Горького» (RU)*

Автор(ы): *Александров Дмитрий Валерьевич, Иванов Александр Андреевич (RU)*

Заявка № 2011612972

Дата поступления 26 апреля 2011 г.

Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ
24 июня 2011 г.



Руководитель Федеральной службы по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам

Б.П. Симонов

Приложение 4



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе
ГОУ ВПО «УрГУ»

А.О. Иванов

(подпись)

«07» апреля 2010 г.

Экспертное заключение о возможности опубликования

Я, председатель экспертной комиссии (или руководитель-эксперт) заведующий лабораторией математического моделирования физико-химических процессов в многофазных средах

(наименование подразделения)

Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Уральский государственный университет им. А.М.Горького», рассмотрев статью Александрова Д.В., Асеева Д.Л., Мальгина А.П. «К теории процессов затвердевания с неравновесной двухфазной зоной» 39 страниц

(Ф.И.О. автора, вид, название материала, количество листов)

подтверждаю, что в материале не содержатся сведения, относящиеся к государственной тайне. Материал не патентоспособен и не содержит сведений конфиденциального характера и «ноу-хау».

На публикацию материалов не следует
(следует ли)

получить разрешение _____
(организации, данный пункт вводится при необходимости)

Закключение: это позволяет мне сделать заключение, что рассмотренный материал может быть опубликован в открытой печати и вывезен за границу для опубликования

Председатель комиссии (руководитель-эксперт)

Зав. лабораторией математического моделирования физико-химических процессов в многофазных средах

(должность, подпись, инициалы и фамилия)

А.Ю. Зубарев

Главный специалист ОНТИ УНИ _____

(подпись)

Н.П. Невраева

Начальник Первого отдела _____

(подпись)

А.Г. Гришин

УДК 536.421.4

© 2011 г. Д. В. Александров¹, Д. Л. Асеев, А. П. Малыгин

К ТЕОРИИ ПРОЦЕССОВ ЗАТВЕРДЕВАНИЯ С НЕРАВНОВЕСНОЙ ДВУХФАЗНОЙ ЗОНОЙ

Проведено теоретическое исследование процесса направленной кристаллизации бинарных систем при наличии неравновесной двухфазной зоны. Развита нелинейная математическая модель процесса и построено ее приближенное аналитическое решение с учетом процессов нуклеации и роста твердой фазы.

Ключевые слова: затвердевание, двухфазная зона, фазовые переходы, сплавы, нуклеация.

ВВЕДЕНИЕ

Молекулярно-кинетическая теория процесса нуклеации и методы расчета скорости нуклеации для однокомпонентных систем описаны во многих работах (см., например, [1–5]). Эта теория основана на том, что в результате флуктуации плотности в метастабильном расплаве образуются микрообразования новой фазы. При этом, если их размер превышает некоторый критический, они становятся способными к дальнейшему росту. В работе [6] (см., также, [2, 7]) приводится формула для скорости нуклеации

$$I = I_* \exp\left(-\frac{p}{\Delta\theta^2}\right), \quad (1)$$

где p – размерное число Гиббса, $\Delta\theta$ – переохлаждение в кристаллизующемся расплаве, I_* – предэкспоненциальный фактор (считается постоянной величиной). Будем предполагать, что частицы имеют сферическую форму, тогда их рост происходит по следующему закону, выведенному в [7]:

$$\frac{dr}{dt} = \frac{\beta_* \Delta\theta}{1 + \beta_* (L_v / \lambda_1) r}, \quad (2)$$

где r – радиус частицы, β_* – кинетический коэффициент, L_v – скрытая теплота фазового перехода, λ_1 – коэффициент теплопроводности расплава. Расчеты, проведенные в работе [8], показывают, что эта формула пригодна и для описания кристаллизации бинарных расплавов.

Будем моделировать рассматриваемую систему, как взвесь твердых сферических частиц в однокомпонентной переохлажденной жидкости, однородную в макроскопическом отношении. Эволюция кристаллов в такой двухфазной смеси описывается кинетическим уравнением для функции плотности распределения $f(t, r)$ частиц по радиусам и уравнением баланса тепла для величины переохлаждения $\Delta\theta$. Если пренебрегать

¹dmitri.alexandrov@usu.ru

случайными флуктуациями скорости роста частиц и предполагать поле температуры однородным, эти уравнения можно записать в следующей форме:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{dr}{dt} f \right) = 0, \quad (3)$$

$$\rho C \frac{d\Delta\theta}{dt} = -L_V \int_{r_{cr}}^{\infty} 4\pi r^2 \frac{dr}{dt} f dr, \quad \Delta\theta = \theta_p - \theta. \quad (4)$$

Здесь r_{cr} — минимальный размер кристаллов (радиус критических зародышей), ρ и C — плотность и удельная теплоемкость смеси, θ — температура, θ_p — температура фазового перехода. Для простоты полагаем, что эти коэффициенты не зависят от температуры, а также от объемной концентрации твердой фазы. Последнее приближенно справедливо при малых концентрациях твердых кристаллов, когда указанные величины характеризуют свойства жидкой фазы.

Далее рассматриваем такую ситуацию, когда жидкость, первоначально не содержащая кристаллов, практически мгновенно охлаждается в начальный момент ниже температуры замерзания на величину $\Delta\theta_0$. Тогда условия, которые нужно наложить на решения системы (3) и (4), имеют вид

$$f = 0, \quad \Delta\theta = \Delta\theta_0, \quad t = 0, \quad (5)$$

$$\frac{dr}{dt} f = I_* \exp\left(-\frac{n}{\Delta\theta^2}\right), \quad r = r_{cr}. \quad (6)$$

Совокупность уравнений (2)–(6) представляет собой полную систему соотношений для описания процесса объемной кристаллизации переохлажденного расплава. Однако, выписанные здесь уравнения не учитывают процессы укрупнения частиц в результате их взаимодействия (перегонка через жидкую фазу, агломерация, коагуляция и т.д.). Это означает, что общая объемная доля кристаллов в расплаве должна оставаться малой и не может превышать некоторого критического значения, выше которого данная теория не способна адекватно описать изучаемый процесс. Для исследования кристаллизации на более поздних стадиях необходимо применять кинетическую теорию, которая учитывает перечисленные выше эффекты [7].

Решение уравнения (3) с граничными условиями (5) и (6) можно записать в виде

$$f(t, r) = \left(1 + \beta_* \frac{L_V}{\lambda_t} r\right) \eta(x(t) - y(r)) H(x(t) - y(r)), \quad (7)$$

где $H(u)$ — функция Хевисайда,

$$x(t) = \beta_* \int_0^t \Delta\theta(\tau) d\tau, \quad y(r) = \int_0^r \left(1 + \beta_* \frac{L_V}{\lambda_t} r\right) dr = r + \frac{1}{2} \beta_* \frac{L_V}{\lambda_t} r^2.$$

С физической точки зрения функция Хевисайда, стоящая в правой части уравнения (7), показывает, что радиус кристаллов в зоне ограничен некоторым максимальным значением, которое имеют частицы, появившиеся в первоначальный момент времени. Кроме этого, для простоты полагаем радиус критических зародышей нулевым: $r_{cr} = 0$. Интегрируя уравнение (2) с граничным условием $r = 0$ при $t = \tau$, получаем

$$r = (\sqrt{1 + 2q(x(t) - x(\tau))} - 1)/q, \quad (8)$$

где $q = \beta_* L_V / \lambda_1$. Последнее соотношение определяет радиус $r(t)$ кристаллов, появившихся в момент времени $t = \tau$. В частности, при $\tau = 0$ формула (8) определяет радиус кристаллов, образовавшихся в начальный момент, к моменту времени t .

В соотношении (7) функция распределения f выражена через величину переохлаждения $\Delta\theta$, которая зависит от f посредством уравнения (4). Это не позволяет получить явное представление для плотности f как функции t и r . В этом и заключается главная трудность рассматриваемой нелинейной задачи. Однако, в работах [7, 9] предложен оригинальный способ решения этой проблемы. Подставим уравнение (7) в правую часть (4) и заменим переменную r при любом постоянном t на новую переменную τ при помощи равенства $x(\tau) = x(t) - y(r)$. При этом $\beta_* \Delta\theta(\tau) d\tau = (1 + qr) dr$, а пределам интегрирования $r = 0$ и $r = r|_{t=0}$ по параметру r будут соответствовать пределы интегрирования $\tau = t$ и $\tau = 0$ по τ . Учитывая (8), получаем

$$\frac{d\Delta\theta}{dt} = -4\pi \frac{\beta_* L_V}{\rho C} \Delta\theta \int_0^t w(t, \tau) \exp(p \cdot S(\tau)) d\tau, \quad (9)$$

$$w(t, \tau) = \frac{1}{q^2} \frac{(\sqrt{1 + 2q(x(t) - x(\tau))} - 1)^2}{\sqrt{1 + 2q(x(t) - x(\tau))}}, \quad S(\tau) = -\frac{1}{\Delta\theta(\tau)^2}. \quad (10)$$

Для дальнейшего упрощения функционально-интегрального уравнения (9) учитываем, что обычно параметр p значительно больше $\Delta\theta^2$ [10]. Последнее соответствует достаточно высокой энергии активации процесса образования зародышей. В этом случае естественно использовать для приближенного вычисления интеграла в (9) известный метод Лапласа [11]. Из выражения для функции $S(\tau)$ следует, что

$$\frac{dS}{d\tau} = \frac{2}{\Delta\theta^3} \frac{d\Delta\theta}{d\tau} < 0,$$

т.е. максимум функции $S(\tau)$ достигается на границе $\tau = 0$ интервала ее определения. Используя для оценки производных от $\Delta\theta$ по τ уравнение (9), видим, что первые три производные от S по τ в точке $\tau = 0$ обращаются в нуль, а четвертая производная равна

$$S^{IV}(0) = \left. \frac{d^4 S}{d\tau^4} \right|_{\tau=0} = -16\pi \frac{\beta_*^2 L_V}{\rho C} \exp\left(-\frac{p}{\Delta\theta_0^2}\right) \neq 0.$$

С учетом лишь главного члена асимптотического разложения интеграла в (9), имеем [11]

$$\begin{aligned} \int_0^t w(t, \tau) \exp(p \cdot S(\tau)) d\tau &\approx \\ &\approx \frac{1}{4} \Gamma\left(\frac{1}{4}\right) \left[\frac{24}{p \cdot S^{IV}(0)} \right]^{1/4} \exp\left(-\frac{p}{\Delta\theta_0^2}\right) w(t, 0) = l_1 \cdot w(t, 0), \end{aligned}$$

где $\Gamma(\cdot)$ — гамма-функция Эйлера. Подставляя последнее выражение в (9), получаем

$$\frac{d\Delta\theta}{dt} = -4\pi \frac{\beta_* L_V}{\rho C} l_1 w(t, 0) \Delta\theta. \quad (11)$$

Преобразуем интегро-дифференциальное уравнение (11) к обыкновенному дифференциальному при помощи преобразования

$$\frac{d\Delta\theta}{dt} = \frac{d\Delta\theta}{dx} \frac{dx}{dt} = \beta_* \Delta\theta \frac{d\Delta\theta}{dx}.$$

Тогда, с учетом (10), из (11) получим следующее уравнение:

$$\frac{d\Delta\theta}{dx} = -\frac{l_2}{q^2} \frac{(\sqrt{1+2qx}-1)^2}{\sqrt{1+2qx}}, \quad l_2 = 4\pi \frac{l_1 L_V}{\rho C}. \quad (12)$$

С учетом граничного условия $\Delta\theta = \Delta\theta_0$ при $x = 0$ решение уравнения (12) имеет вид

$$\Delta\theta = \Delta\theta_0 - \frac{l_2}{q^2} \left(\frac{1}{3} (z^{3/2} - 1) - z + \sqrt{z} \right), \quad z = 1 + 2qx. \quad (13)$$

Зависимость времени t от параметра z описывается квадратурой

$$2q\beta_* \cdot t = \int_1^z \frac{dz}{\Delta\theta_0 - l_2/q^2 (1/3(z^{3/2} - 1) - z + \sqrt{z})}. \quad (14)$$

В работе [7] этот интеграл вычислен только для предельного случая $\beta_* L_V / \lambda_1 \rightarrow 0$ (так называемый кинетический режим роста кристаллов). Однако, методом разделения на простые дроби, этот интеграл можно взять в общем виде. Выполняя довольно трудоемкие технические преобразования, получим

$$t = -\frac{q^2}{\beta_* l_2} \left[\frac{r}{(r-1)^2} \ln \frac{r - \sqrt{z}}{\sqrt{z} + (r-3)\sqrt{z} + (r^2 - 3r + 3)} + \right. \\ \left. + \sqrt{3} \frac{r^2 - 3r + 2}{r-1} \left(\arctan \frac{2\sqrt{z} + r - 3}{\sqrt{3}(r-1)} - \frac{\pi}{6} \right) \right], \quad (15)$$

где $r = 1 + q(3\Delta\theta_0/l_2)^{1/2}$ — корень кубического уравнения

$$r^3 - 3r^2 + 3r - 1 - 3q^3 \Delta\theta_0 / l_2 = 0.$$

Таким образом, зависимость переохлаждения $\Delta\theta$ от времени t полностью определена уравнениями (13) и (15) в параметрическом виде: $\Delta\theta = \Delta\theta(z)$ и $t = t(z)$ ($z > 1$).

МОДЕЛЬ ЗАТВЕРДЕВАНИЯ С ДВУХФАЗНОЙ ЗОНОЙ

Рассмотрим установившийся процесс направленного затвердевания вдоль оси z , стационарный в движущейся системе координат, связанной с двухфазной зоной. Границы зоны с кристаллом и расплавом движутся с постоянной скоростью V . Поверхность двухфазная зона—расплав, температура которой равна температуре фазового перехода, располагается в точке $z = 0$. Граница кристалл—двухфазная зона $z = -h$ (где h — ширина переохлажденной области) является неизвестной и определяется из решения задачи. Схематически изучаемый процесс представлен на рис. 1.

Дифференциальные уравнения тепломассопереноса в движущейся системе координат выглядят следующим образом [12–15]:

$$\frac{d}{dz} \left(\lambda \frac{d\theta}{dz} \right) - VL_V \frac{d\varphi}{dz} = 0, \quad (16)$$

$$-V \frac{d}{dz} ((1 - \eta)\rho) = \frac{d}{dz} \left(\rho \frac{dz}{dz} \right) + k\sigma V \frac{dz}{dz}, \quad (17)$$

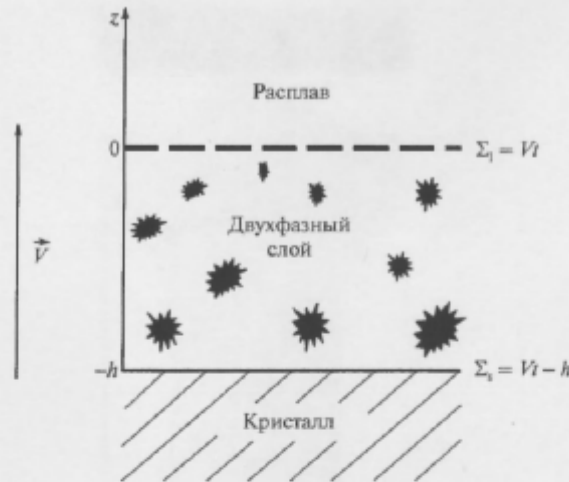


Рис. 1. Схема процесса направленного затвердевания с неравновесной двухфазной зоной.

где σ – концентрация примеси, V – скорость кристаллизации, φ – доля твердой фазы, k – коэффициент распределения примеси. Коэффициенты переноса λ и D задаются соотношениями:

$$\lambda(\varphi) = \lambda_1(1 - \varphi) + \lambda_2\varphi, \quad D(\varphi) = D_1(1 - \varphi),$$

где D_1 – коэффициент диффузии примеси в жидкости. Здесь считается, что число Льюиса $Le = a/D \gg 1$ (a – коэффициент температуропроводности). Температурные поля в кристалле и расплаве описываются постоянными температурными градиентами g_2 и g_1 . Границы двухфазной зоны с расплавом и кристаллом $z = 0$ и $z = -h$ определяются условием равенства температур локальным температурам ликвидуса, т.е. концентрационное переохлаждение на них равно нулю. Кроме этого, на них выполняются стандартные условия баланса тепла и массы

$$\varphi = 0, \quad \theta = \theta_p, \quad \sigma = \sigma_1, \quad z = 0,$$

$$\lambda_1 n \cdot \nabla \theta = \lambda_1 n \cdot \nabla \theta_1, \quad D n \cdot \nabla \sigma = D_1 n \cdot \nabla \sigma_1, \quad z = 0,$$

$$\theta = \theta_p, \quad \lambda_2 n \cdot \nabla \theta_s - \lambda n \cdot \nabla \theta = L_V(1 - \varphi) \frac{d\Sigma_s}{d\tau}, \quad z = -h,$$

$$D n \cdot \nabla \sigma + (1 - k)(1 - \varphi) \sigma \frac{d\Sigma_s}{d\tau} = 0, \quad z = -h,$$

где Σ_s – координата границы твердая фаза – двухфазная зона, а нижние индексы s и l соответственно обозначают величины в твердой и жидкой фазах. Скорость кристаллизации V определяется так же, как и в работе [15]

$$V = \frac{\lambda_2 g_2 - \lambda_1 g_1}{L_V}.$$

Таким образом, она совпадает со значениями, полученными для затвердевания с равновесной двухфазной зоной и фронтальным режимом. Интегрируя уравнение (16),

учитывая непрерывность температурного градиента и условие $\varphi = 0$ на границе двухфазная зона – расплав, получаем

$$\lambda(\varphi) \frac{d\theta}{dz} - VL_V \varphi = \lambda_1 g_1. \quad (18)$$

Далее будем использовать уравнение Шейла вместо соотношения (17) для описания распределения примеси в двухфазной зоне [16]:

$$\sigma = \frac{\sigma_1}{(1 - \varphi)^{1-k}}, \quad (19)$$

где σ_1 – концентрация примеси в расплаве. Формула (19) неоднократно приводилась различными авторами (см., например, [16, 17]); она также известна как правило неравновесного рычага. Уравнение (19) хорошо описывает перераспределение растворенного компонента в растущем кристалле и расплаве для широкого диапазона экспериментальных условий [2]. Уравнение Шейла рассматривается как простейшее приближение, учитывающее эффект накопления примеси перед фронтом затвердевания, который играет ключевую роль в развитии переохлаждения. Математически этот закон может быть получен интегрированием уравнения (17) при условии $D = 0$.

Для описания кинетических механизмов зарождения и роста элементов твердой фазы в двухфазной зоне, применим использованные выше предположения и соотношения. Скорости нуклеации и роста кристаллов задаются уравнениями (1) и (2), а функция плотности распределения кристаллов по размерам удовлетворяет дифференциальному уравнению (3) с граничным условием (6). Радиус критических зародышей по-прежнему принимается нулевым. Переписывая постановку задачи в квазистационарной системе координат, движущейся со скоростью V , получаем

$$-(1 + qr) \frac{dr}{dz} = \frac{\beta_*}{V} \Delta \theta, \quad (20)$$

$$-\frac{\partial f}{\partial z} + \frac{\beta_*}{V} \Delta \theta \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{f}{1 + qr} \right) = 0, \quad (21)$$

$$f|_{r=0} = \frac{I_*}{\beta_* \Delta \theta} \exp \left(-\frac{p}{\Delta \theta^2} \right), \quad (22)$$

где $\Delta \theta = \theta_p(\sigma) - \theta$ – концентрационное переохлаждение, $q = \beta_* L_V / \lambda_1$, а функция $f = f(z, r)$ не зависит от времени. Для объемной доли шарообразных твердых кристаллов в двухфазной зоне имеем соотношение

$$\varphi = \int_0^\infty \frac{4\pi}{3} r^3 f(z, r) dr. \quad (23)$$

Еще раз подчеркнем, что приведенная кинетическая теория не учитывает механизмов роста кристаллов в результате их взаимодействия. Это означает, что общая доля твердых частиц в переохлажденной области должна быть достаточно мала (только тогда уравнения (20)–(22) правильно описывают процесс), т.е. φ должно быть меньше некоторого критического значения: $\varphi < \varphi_{cr}$. Таким образом, модель, описывающая процесс направленной кристаллизации с переохлажденной двухфазной зоной, полностью определена. Далее, перейдем к вопросу построения решений системы уравнений (18)–(23).

ПЕРЕОХЛАЖДЕНИЕ В ДВУХФАЗНОЙ ЗОНЕ

Ключевой величиной, определяющей процессы в двухфазной зоне, является переохлаждение

$$\Delta\theta(z) = \theta_p(\sigma(z)) - \theta(z) = \theta_p^0 - m\sigma(z) - \theta(z),$$

где θ_p^0 — температура фазового перехода чистого вещества, m — наклон линии ликвидуса. Используя формулы (18) и (19), получаем следующее уравнение для функции переохлаждения:

$$-b_1 \frac{d}{dz} \Delta\theta = \frac{b_2 + \varphi}{b_3 + \varphi} + h_1 \frac{1}{(1-\varphi)^{2-k}} \frac{d\varphi}{dz}, \quad (24)$$

$$b_1 = \frac{\lambda_s - \lambda_l}{VL_V}, \quad b_2 = \frac{\lambda_l g_1}{VL_V}, \quad b_3 = \frac{\lambda_l}{\lambda_s - \lambda_l}, \quad b_4 = (1-k)m\sigma_1 \frac{\lambda_s - \lambda_l}{VL_V} \quad (25)$$

с граничными условиями $\Delta\theta(0) = \Delta\theta(-h) = 0$. Решение уравнения (21) с граничным условием (22) можно записать в виде

$$f = \left(1 + \beta_* \frac{L_V}{\lambda_l} r\right) \eta(x(z) - y(r)) H(x(z) - y(r)). \quad (26)$$

Здесь введены обозначения

$$x(z) = \frac{\rho_*^0}{V} \int_z^0 \Delta\theta(\xi) d\xi, \quad y(r) = \int_0^r \left(1 + \beta_* \frac{L_V}{\lambda_l} r\right) dr,$$

$$\eta(u) = \frac{I_*}{\beta_* \Delta\theta(u)} \exp\left(-\frac{p}{\Delta\theta(u)^2}\right).$$

Интегрируя уравнение (20) с граничным условием $r = 0$ при $z = \zeta$, находим

$$r = (\sqrt{1 + 2q(x(z) - x(\zeta))} - 1)/q. \quad (27)$$

Последнее соотношение определяет радиус $r(z)$ кристаллов, появившихся в точке двухфазной зоны с координатой $z = \zeta$. Далее, переходя в (23) от переменной интегрирования r к новой переменной ζ по формуле $x(\zeta) = x(z) - y(r)$ (при фиксированном значении z), получаем следующее выражение для доли φ твердых частиц в двухфазной зоне:

$$\varphi(z) = \frac{4\pi I_*}{3V} \int_z^0 w(z, \zeta) \exp(pS(\zeta)) d\zeta, \quad (28)$$

$$w(z, \zeta) = q^{-3} (\sqrt{1 + 2q(x(z) - x(\zeta))} - 1)^3, \quad S(\zeta) = -1/\Delta\theta(\zeta)^2.$$

Для вычисления интеграла в (27) используем метод Лапласа ($p \gg \Delta\theta^2$). Для его реализации необходимо определить точку максимального переохлаждения в двухфазной зоне. Приравняв к нулю производную $\Delta\theta'(z)$ в (24) и решая полученное дифференциальное уравнение для функции $\varphi(z)$, находим следующее условие для точки v максимального переохлаждения:

$$v = \Sigma(\varphi) = -\frac{b_4}{1-k} \frac{1}{(1-\varphi)^{1-k}} \left[1 + \frac{b_3 - b_2}{b_2 - 1} F\left(k-1, 1, k; \frac{1-\varphi}{b_2-1}\right) \right] + \quad (29)$$

$$+ \frac{b_4}{1-k} \left[1 + \frac{b_3 - b_2}{b_2 - 1} F\left(k-1, 1, k; \frac{1}{b_2-1}\right) \right],$$

где $F(\alpha, \beta, \gamma; x) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(\alpha)_k (\beta)_k}{(\gamma)_k} \frac{x^k}{k!}$ – гипергеометрическая функция [18]. Учитывая главный член асимптотического разложения интеграла в (27), получаем (см. [11])

$$\varphi(z) = a(v) \cdot w(z, v), \quad (30)$$

$$a(v) = \frac{4\pi I_*}{3V} \sqrt{\frac{\pi \Delta\theta^3(v)}{p \Delta\theta''(v)}} \exp\left(-\frac{p}{\Delta\theta^2(v)}\right).$$

Из уравнения (29) следует, что $\varphi(v)$ приблизительно равно нулю ($w(v, v) = 0$). Так как функция $\varphi(z)$ убывает (это легко проверить дифференцируя уравнение (27)), то $\varphi(z) \approx 0$ на всем промежутке $v \leq z \leq 0$. Строго говоря, $\varphi(z) < 0$ при $v < z < 0$. Однако, исходя из физического смысла φ и приближенности метода Лапласа, следует, что $\varphi(z) \sim 0$ на этом интервале. Используя эту аппроксимацию в уравнении (24), находим

$$\Delta\theta(z) = -g_1 z, \quad v < z < 0. \quad (31)$$

Подставляя полученное линейное приближение для переохлаждения (30) в уравнение (27) при $z = v$, находим значение функции φ в точке v :

$$\varphi(v) = \frac{4\pi I_*}{3V} \int_v^0 \left(\sqrt{\frac{1}{q^2} + \frac{g_1 \beta_*}{qV} (v^2 - \xi^2)} - \frac{1}{q} \right)^3 \exp\left(-\frac{p}{g_1^2 \xi^2}\right) d\xi.$$

Наконец, подставляя $\varphi(v)$ в (28), получаем трансцендентное уравнение

$$v = \Sigma(\varphi(v)), \quad (32)$$

нетривиальное решение которого определяет точку v максимального переохлаждения в двухфазной зоне. Выражение для $a(v)$ содержит в знаменателе величину $\Delta\theta''(v)$, но из (30) следует, что $\Delta\theta''(v) = 0$. Для устранения этого противоречия необходимо еще раз вычислить интеграл в (27) методом Лапласа на промежутке $-h < z \leq v$, используя формулу для граничной максимальной точки $z = v$ (см. [11]). В результате будем иметь выражение для φ :

$$\varphi(z) = b(v) \cdot w(z, v), \quad b(v) = -\frac{4\pi I_* v^3}{3V 2p} g_1^2 \exp\left(-\frac{p}{(g_1 v)^2}\right).$$

Таким образом, функция объемной доли твердых частиц в двухфазной зоне полностью определена:

$$\varphi(z) = \begin{cases} 0 & v \leq z \leq 0, \\ b(v) \cdot w(z, v) & -h < z \leq v. \end{cases} \quad (33)$$

Перейдем в уравнении (24) к новой переменной x_v по формулам

$$\begin{aligned} x_v &= x(z) - x(v) = \frac{\beta_*}{V} \int_z^v \Delta\theta(\xi) d\xi, \\ \frac{d}{dz} &= \frac{dx_v}{dz} \frac{d}{dx_v} = -\frac{\beta_*}{V} \Delta\theta \frac{d}{dx_v}. \end{aligned} \quad (34)$$

В результате, для поля переохлаждения в области $-h < z < v$, получим следующее соотношение:

$$\Delta\theta(x_v) \cdot \Delta\theta'(x_v) = -c_1 \frac{1}{(1-\varphi)^{2-k}} \frac{d\varphi}{dx_v} \cdot \Delta\theta(x_v) + c_2 \frac{\frac{h}{z} + \frac{v}{z}}{b_3 + \varphi}, \quad (35)$$

$$c_1 = b_4/b_1, \quad c_2 = V/(\beta_* b_1), \quad \varphi = \varphi(x_v) = b w(x_v),$$

$$w(x_v) = (\sqrt{1 + 2qx_v} - 1)^3/q^3.$$

Изменению z от v до $-h$ соответствует изменение параметра x_v от 0 до некоторого значения x_h . В точке $x_v = 0$ ($z = v$) из формулы (30) определяем граничное условие $\Delta\theta(0) = -g_1 v$ для уравнения (34). Таким образом, задача с подвижными границами сведена к решению дифференциального уравнения (34) абелевского типа с заданным граничным условием (т.е. к задаче Коши). Это уравнение легко интегрируется численными методами.

Ширина h двухфазной зоны находится из условия равенства температуры вещества на границе с кристаллом температуре ликвидуса, т.е. $\Delta\theta(x_h) = 0$. Подставляя это условие в уравнение (34), получаем выражение

$$(b_2 + \varphi)/(b_3 + \varphi) = 0,$$

которое не выполняется ни при каких значениях физических параметров ($\varphi > 0$, $b_2 > 0$, $b_3 > 0$). Это противоречие может быть устранено только предположением $\varphi = 1$ при $x_v = x_h$, т.е. на границе с кристаллом все вещество двухфазной зоны переходит в твердое состояние. Этот факт вполне согласуется с теорией объемной кристаллизации, предположения которой относительно кинетики роста кристаллов были использованы для развития рассматриваемого подхода. Следовательно, значение параметра x_h легко определяется из условия $b w(x_h) = 1$:

$$x_h = \frac{1}{2q} ((b^{-1/3} q + 1)^2 - 1). \quad (36)$$

Зависимость пространственной координаты z от параметра x_v определяется из (33):

$$z = z(x_v) = v - \frac{V}{\beta_*} \int_0^{x_v} \frac{d\xi}{\Delta\theta(\xi)}. \quad (37)$$

Таким образом, концентрационное переохлаждение в двухфазной зоне полностью определено. Зависимость $\Delta\theta(z)$ на промежутке $v < z \leq 0$ дается формулой (30), а на промежутке $-h < z < v$ задается параметрически $\Delta\theta = \Delta\theta(x_v)$, $z = z(x_v)$ уравнениями (34) и (36), где параметр x_v изменяется от 0 до x_h .

На рис. 2 построена зависимость переохлаждения $\Delta\theta$ от пространственной координаты z согласно полученным формулам. У границы с расплавом ($v < z < 0$), где $\varphi \approx 0$, т.е. зарождение и рост кристаллов практически отсутствуют, переохлаждение возрастает по линейному закону (здесь имеется в виду возрастание не по переменной z , а возрастание по мере продвижения в глубь двухфазной зоны от границы с расплавом). Когда система достигает максимального переохлаждения, в ней начинают интенсивно расти элементы твердой фазы, которые достаточно быстро снимают переохлаждение благодаря выделению скрытой теплоты кристаллизации. В результате, переохлаждение довольно быстро падает до значения, близкого к нулю, и, затем в значительной части двухфазной зоны медленно приближается к нулю. В работе [13] приведены экс-

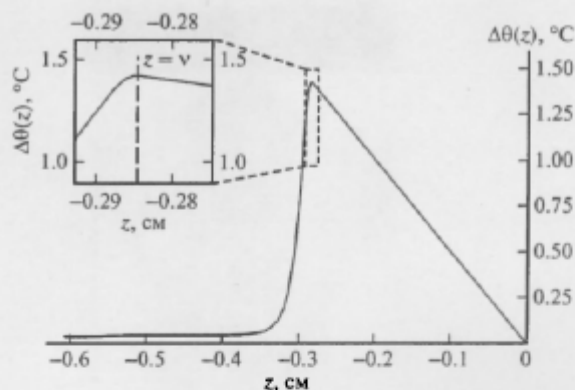


Рис. 2. Зависимость переохлаждения в двухфазной зоне от пространственной координаты согласно формулам (30), (34) и (36). Использованы значения параметров: $b_1 = 0.2 \text{ см } (^{\circ}\text{C})^{-1}$, $b_2 = 2$, $b_3 = 2$, $b_4 = 5.4 \text{ см}$, $k = 0.1$, $q = 5 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$, $p = 10 (^{\circ}\text{C})^2$, $\beta_s/V = 2 \cdot 10^4 (^{\circ}\text{C})^{-1}$, $I_s/V = 2 \cdot 10^4 \text{ см}^{-4}$.

периментальные данные, полученные для неравновесного затвердевания в различных системах. Теоретическая (рис. 2) и экспериментальная (работа [13]) кривые имеют одинаковую характерную структуру: быстрое линейное возрастание с убыванием z от границы с расплавом $z = 0$, достижение максимума и последующее спадание до нуля. Это позволяет говорить о том, что развиваемая теория вполне адекватно описывает процесс затвердевания.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

На рис. 3 представлена функция $\phi(z)$, согласно формуле (32). Хорошо видно сложное поведение этой зависимости по сравнению со случаем квазиравновесной двухфазной зоны (например, наличие точки перегиба, показанное на врезке к рис. 3). Также заметно, что значение ϕ приближается к единице по мере продвижения в глубь зоны (аналитически этот факт показан при выводе уравнения (35)). Рассмотрим уравнение (19) для концентрации примеси. На первый взгляд, видно явное противоречие: при $\phi \rightarrow 1$ имеем $\sigma \rightarrow \infty$, чего не может быть в реальной системе. Для объяснения этого факта обратим внимание на то, что формула (19) описывает поле концентрации по жидкой фазе двухфазной зоны. Это значит, что количество примеси в жидком веществе любой точки зоны равно $\Sigma = (1 - \phi) \cdot \sigma = \sigma_0 \cdot (1 - \phi)^k$.

Следовательно, если ϕ обращается в единицу, то общее количество примеси в расплаве не становится бесконечно большим, а наоборот, — стремится к нулю. Последнее вполне естественно: количество вещества в нулевом объеме равно нулю.

С математической точки зрения исследуемая задача полностью решена. Однако, как было отмечено выше, использованная здесь кинетическая теория зарождения и роста кристаллов, действует лишь при определенных значениях ϕ , которые не могут превышать некоторой критической величины $\phi_{cr} < 1$. Это означает, что построенные решения могут применяться только при значениях z , больших некоторого z_{cr} , соответствующего ϕ_{cr} . Для описания поведения системы при $-h < z < z_{cr}$ необходимо рассматривать кинетическую теорию роста частиц, которая будет учитывать механизмы агломерации и перегонки, играющие преобладающую роль на поздних стадиях объемной кристаллизации расплава [7]. Можно пойти и другим путем для изучения системы

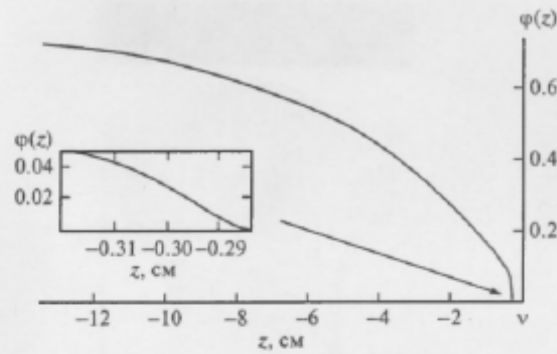
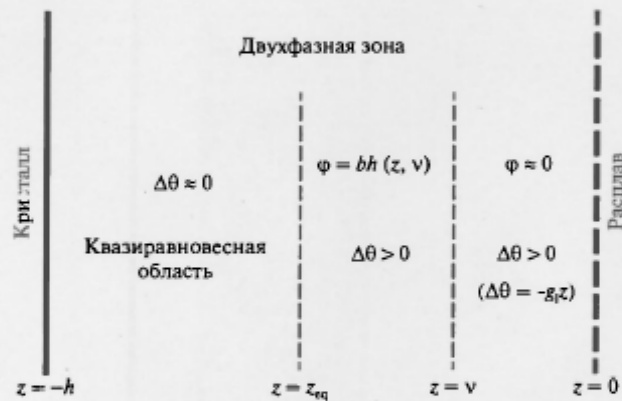
Рис. 3. Объемная доля $\varphi(z)$ кристаллов в двухфазной зоне ($v \approx -0.28$ см).

Рис. 4. Структура неравновесной двухфазной зоны.

при $z < z_{cr}$. Вместо рассмотрения такой сложной кинетической теории достаточно применить хорошо изученную теорию квазиравновесной двухфазной зоны, в которой пренебрегается переохлаждением [12–14]. Правомочность применения этой теории следует из того факта, что величина переохлаждения $\Delta\theta$ близка к нулю начиная с некоторого значения $z = z_{eq}$ (см. рис. 2, $z_{eq} \sim -0.35$ см.).

Таким образом, можно условно разделить неравновесную двухфазную зону на две области (рис. 4). В первой из этих областей, прилегающей к расплаву ($z_{eq} < z < 0$), переохлаждение существенно отлично от нуля. Во второй, граничащей с кристаллом ($-h < z < z_{eq}$), переохлаждение практически снято скрытой теплотой затвердевания, выделяющейся при росте частиц твердой фазы. Поэтому к этой области можно применить квазиравновесную теорию. В свою очередь, первую область можно тоже разделить на два региона (рис. 4). В области, прилегающей к расплаву ($v < z < 0$), элементы твердой фазы практически отсутствуют — их объемная доля близка к нулю. За счет этого там происходит рост переохлаждения по линейному закону (30). Во втором ре-

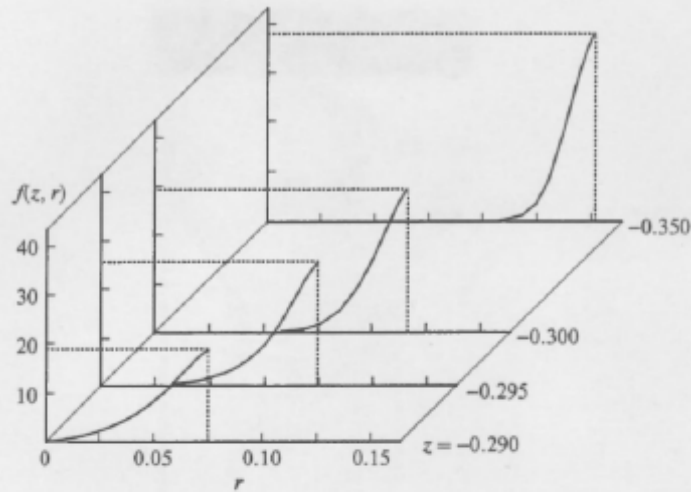


Рис. 5. Функция $f(z, r)$ (см^{-4}) плотности распределения кристаллов по размерам в зависимости от радиусов кристаллов r (см) в различных точках двухфазной зоны: $z = -0.29, -0.295, -0.3$ и $z = -0.35$ см .

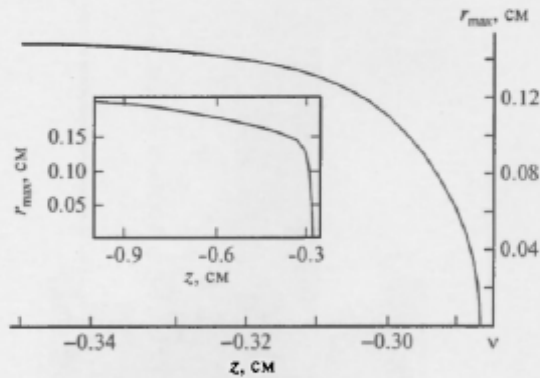


Рис. 6. Зависимость радиусов максимальных кристаллов от пространственной координаты.

гионе ($z_{\text{eq}} < z \leq v$) начинается интенсивный рост частиц новой фазы, которые достаточно быстро снимают переохлаждение (рис. 2).

В заключение, продемонстрируем эволюцию функции плотности распределения твердых частиц по размерам в двухфазной зоне. На рис. 5 построены графики функции $f(z, r)$ в точках $z = -0.29; -0.295, -0.3$ и $z = -0.35$ см . Видно, что при движении в глубь зоны (от расплава), средний и максимальный радиусы кристаллов возрастают. Причем кристаллов с меньшими радиусами становится меньше. Значения максимальных радиусов кристаллов в каждой точке зоны могут быть легко определены. Для этого достаточно приравнять к нулю аргумент функции Хевисайда в (25) и решить получившееся квадратное уравнение. Сделав это, найдем

$$r_{\text{max}} = (\sqrt{1 + 2qx_v} - 1)/q.$$

Например, в точке $z = -0.29$ см. значение $r_{\max} \approx 0.08$ см, при $z = -0.295$ см имеем $r_{\max} \approx 0.1$ см, при $z = -0.3$ см величина $r_{\max} \approx 0.12$ см и при $z = -0.35$ см значение $r_{\max} \approx 0.15$ см. На рис. 6 показана зависимость r_{\max} от пространственной координаты z . Видно, что с уменьшением переохлаждения по мере продвижения в глубь двухфазной зоны от границы с расплавом скорость увеличения максимальных радиусов уменьшается. Последнее особенно хорошо видно на врезке рис 6 при $z < z_{eq}$, где значение переохлаждения близко к нулю (см. рис. 2) Радиус r_{\max} возрастает гораздо медленнее, чем на участке $z_{eq} < z < v$, где функция растет довольно резко (как и ранее, имеется в виду возрастание не по координате z а по расстоянию от границы с расплавом). Этот результат следует непосредственно из уравнения (20), из которого видно, что скорость роста частицы прямо пропорциональна значению переохлаждения $\Delta\theta$ и обратно пропорциональна ее радиусу.

Полученные соотношения позволяют также вычислить количество кристаллов в различных участках зоны. По определению функции f —количество частиц с размерами от r до $r + dr$ в точке z равно $f(z, r)dr$. Для определения полного числа твердых частиц в точке z , нужно проинтегрировать это соотношение по всем возможным размерам кристаллов. Тогда полное число кристаллов на участке $z_1 \leq z \leq z_2$ выразится интегралом

$$\int_{x_2}^{x_1} \int_0^{r_{\max}(x_v)} (1 + qr)\eta(x_v - r - qr^2/2)drdx_v,$$

где значениям параметров x_1 и x_2 соответствуют, согласно уравнению (36), координаты $z_1 = z(x_1)$ и $z_2 = z(x_2)$. Таким образом, на участке $-0.35 \leq z \leq v$ содержится около 260 кристаллов различных размеров (напомним, что, согласно развиваемой теории, на интервале $v \leq z \leq 0$ твердые частицы отсутствуют).

ВЫВОДЫ

В настоящей работе проведено исследование процесса кристаллизации бинарного расплава с неравновесной двухфазной зоной концентрационного переохлаждения. Двухфазная зона моделировалась как взвесь сферических твердых кристаллов, растущих в переохлажденном расплаве. Такой подход позволил использовать при решении задачи математический аппарат теории объемной кристаллизации. Сформулируем основные результаты:

1. Развита теория объемной кристаллизации переохлажденного расплава. В этой теории впервые удалось вывести общую формулу, описывающую зависимость переохлаждения от времени (уравнения (13) и (15)). Ранее такая зависимость была найдена только для предельного случая.
2. Сформулирована квазистационарная модель процесса кристаллизации, которая включает в себя кинетические механизмы, отвечающие за нуклеацию и рост кристаллов в области концентрационного переохлаждения. В эту модель введены физически оправданные упрощения, позволившие в дальнейшем получить аналитический вид решений.
3. Найдены выражения для функций, описывающих плотность распределения кристаллов по размерам (уравнение (25) и рис. 5) и их объемную долю в двухфазном слое (уравнение (32) и рис. 3). Вычислены радиусы наибольших частиц в зоне и определено общее число кристаллов в системе.
4. Получено и решено численно дифференциальное уравнение для ключевой характеристики двухфазной зоны — концентрационного переохлаждения. Построена зависимость переохлаждения от пространственной координаты. Показано, что пере-

охлаждение существенно в узкой области (пограничном слое) зоны, граничащей с расплавом (рис. 2 и 4). В другой области, прилегающей к кристаллу, переохлаждение почти снимается растущими элементами твердой фазы, поэтому этот участок можно описать квазиравновесной теорией.

5. Обнаружено, что в переохлажденном регионе существуют две области с принципиально разным поведением переохлаждения (рис. 4). В первой области, прилегающей к расплаву, нуклеация и рост кристаллов проходят крайне медленно. Поэтому их влияние на процесс, и в частности, на переохлаждение, не существенно. Благодаря этому последнее возрастает по линейному закону (30). Во второй области эти явления играют важную роль и отвечают за снятие переохлаждения перед фронтом затвердевания. Описанная структура двухфазной зоны хорошо согласуется с экспериментальными данными.

6. В работе определены рамки применимости модели. Указано на невозможность применения используемой кинетической теории роста частиц для описания всей двухфазной зоны (теория не работает при больших значениях объемной доли твердой фазы), а также даны некоторые рекомендации, позволяющие адаптировать рассматриваемую модель для всей переохлажденной области.

В заключение можно отметить, что проведенные исследования позволили определить ряд новых нелинейных свойств двухфазной зоны, которые невозможно описать в рамках классической квазиравновесной теории. Кроме этого, в работе удалось построить три новых аналитических решения нелинейной задачи о направленной кристаллизации с двухфазной зоной.

Работа частично выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты 08-01-00298, 09-08-00844, 10-03-00338) и ФЦП "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009–2013 годы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Volmer M., Weber A. Keimbildung in übersättigten Gebilden. — Z. Phys. Chem., 1926, A119, p. 277–301.
2. Флемингс М. Процессы затвердевания. — М.: Мир, 1977. — 423 с.
3. Френкель Я. И. Кинетическая теория жидкостей. — Л.: Изд-во АН СССР, 1945.
4. Зельдович Я. Б. К теории образования новой фазы. — ЖЭТФ, 1942, 12, с. 525–536.
5. Гиббс Д. В. Термодинамика и статистическая механика. — М.: Наука, 1982. — 584 с.
6. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика. — М.: Наука, 1979. — 528 с.
7. Buyevich Yu. A., Alexandrov D. V., Mansurov V. V. Macrokinetics of crystallization. — New-York – Wallingford: Begell House, 2001. — 183 p.
8. Авдонин Н. А. Математическое описание процессов кристаллизации. — Рига.: Зинатне, 1980. — 178 с.
9. Buyevich Yu. A., Mansurov V. V. Kinetics of the intermediate stage of phase transition in batch crystallization. — J. Crystal Growth, 1990, 104, p. 861–867.
10. Чернов А. А., Гиваргизов Е. И., Багдасаров Х. С. и др. Современная кристаллография. Т. 3. Процессы кристаллизации. — М.: Наука, 1980. — 408 с.
11. Федорюк М. В. Асимптотика, интегралы и ряды. — М.: Наука, 1987. — 544 с.
12. Worster M. G. Solidification of an alloy from a cooled boundary. — J. Fluid Mech., 1986, 167, p. 481–501.
13. Борисов В. Т. Теория двухфазной зоны металлического слитка. — М.: Металлургия, 1987. — 224 с.
14. Hills R. N., Loper D. E., Roberts P. H. A thermodynamically consistent model of a mushy zone. — Q. J. Mech. Appl. Math., 1983, 36, p. 505–539.

15. Alexandrov D. V. Solidification with a quasiequilibrium mushy region: analytical solution of nonlinear model. — *J. Crystal Growth*, 2001, **222**, p. 816–821.
16. Kerr R. C., Woods A. W., Worster M. G., Huppert H. E. Solidification of an alloy cooled from above. Part 1. Equilibrium growth. — *J. Fluid Mech.*, 1990, **216**, p. 323–342.
17. Scheil E. Bemerkungen zur schichtkristallbildung. — *Zeichrift für Metallkunde*, 1942, **34**, p. 70–72.
18. Зайцев В. Ф., Полянин А. Д. Справочник: обыкновенные дифференциальные уравнения. — М.: Физматлит, 2001. — 576 с.

Уральский государственный
университет им. А.М. Горького

Поступила в редакцию
12 апреля 2010 г.
Екатеринбург